
Thermoelektrischer Transport durch wechselwirkende Nanostrukturen: Stromgewinnung mit der Quantenpunkt-Wärmemaschine

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Dr. rer. nat.

an der Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität Augsburg



vorgelegt von
Christian H. Schiegg

Augsburg, Dezember 2017

Erstgutachter:

Prof. Dr. Ulrich Eckern

Zweitgutachter:

Prof. Dr. Gert-Ludwig Ingold

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Februar 2018

für Severine

Inhaltsverzeichnis

1	Wozu thermoelektrischer Transport durch Nanostrukturen?	1
2	Das Tight-Binding-Modell	5
2.1	Hamiltonoperator im Tight-Binding-Modell	5
2.1.1	Warum Tight-Binding?	5
2.1.2	Die eindimensionale Kette	7
2.2	Thermoelektrischer Transport	10
2.2.1	Ladungsstromdichte und Transmission	10
2.2.2	Energiestromdichte	13
2.3	Zeitentwicklung des Dichteoperators	15
2.3.1	Der großkanonische Dichteoperator	15
2.3.2	Der Erwartungswert $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle$	16
2.3.3	Numerische Ergebnisse der Zeitentwicklung	19
2.4	Landauer-Büttiker-Formalismus	23
2.4.1	Phänomenologische Herleitung	23
2.4.2	Transmission einer eindimensionalen Streuregion	26
2.4.3	Einfluss der Leads auf die Ströme	29
2.5	Landauer-Büttiker-Formalismus vs. Zeitentwicklung des Dichteoperators . .	32
3	Wechselwirkung zwischen Elektronen im Tight-Binding-Modell	35
3.1	Der Hamiltonoperator mit Wechselwirkung und die Hartree-Fock-Näherung	35
3.2	Zeitentwicklung der Dichtematrix mit Wechselwirkung	38
3.2.1	Hartree-Fock-Näherung und der thermoelektrische Transport	39
3.2.2	Hubbard-Stratonovich-Transformation	44
3.2.3	Hartree-Fock vs. Hubbard-Stratonovich	47
3.3	Der Landauer-Büttiker-Formalismus in Hartree-Fock-Näherung	48
3.3.1	Selbstkonsistente Green'sche Funktion	49
3.3.2	Landauer-Büttiker-Formalismus und das Zweiplatzmodell	51
3.4	Hartree-Fock-Näherung im IRLM	55
3.5	Wechselwirkung zwischen Elektronen auf einem Gitterplatz	58

4	Thermoelemente und lineare Transportkoeffizienten	61
4.1	Peltier- und Seebeck-Effekt	61
4.2	Lineare Transportkoeffizienten	63
4.3	Sommerfeld-Entwicklung der Landauer-Büttiker-Formeln	67
4.4	Das Wiedemann-Franz-Gesetz	69
4.5	Numerisch berechnete Lorenz-Zahlen	71
4.6	Thermoelektrische Gütezahl und Wärmemaschinen	75
5	Transmissionen als Energiefilter und die Nanowärmemaschine	77
5.1	Die Quantenpunkt-Nanowärmemaschine mit drei Zuleitungen	77
5.1.1	Die inkohärente Wärmemaschine	81
5.1.2	Technische Umsetzung der Nanowärmemaschine	83
5.1.3	Die kohärente Wärmemaschine	85
5.2	Die maximale Leistung der inkohärenten Wärmemaschine	90
5.3	Optimierte Transmissionen im Tight-Binding-Modell	95
5.3.1	Die homogene Kette	95
5.3.2	Der homogene Ring	100
5.3.3	Die inhomogene Kette	104
5.4	Die Wärmemaschine mit optimierten Transmissionen	107
5.5	Die Wärmemaschine mit zwei- und dreidimensionalen Streuregionen	111
6	Was wurde gemacht und wie geht's weiter?	115
	Anhang	121
A.1	Berechnung der Koeffizienten a_j der inhomogenen Kette	121
A.2	Transmission eines dreidimensionalen Systems	123
	Literaturverzeichnis	127

1 Wozu thermoelektrischer Transport durch Nanostrukturen?

Mit fortschreitender Miniaturisierung thermoelektrischer, optischer und elektronischer Bauteile ist ein grundlegendes Verständnis von Transportprozessen in Systemen auf der Nanometerskala nicht mehr nur von rein theoretischem Interesse, sondern von direkter Relevanz für technologische Anwendungen. Aus theoretischer Sicht stellen besonders quantenmechanische Systeme im Nichtgleichgewicht mit wechselwirkenden Fermionen eine große Herausforderung dar, weswegen in den letzten Jahren in diesem Themengebiet viel geforscht wurde [1]. Typischerweise betrachtet man hierfür eine Nanostruktur, welche an Zuleitungen gekoppelt ist, um so mit einer Spannung und einem Temperaturgradienten sowohl einen Ladungs-, als auch einen Energiestrom durch die Nanostruktur zu erzeugen. Während für isolierte Systeme mit wechselwirkenden Fermionen (System im Gleichgewicht) bereits sehr gute numerische und analytische Methoden existieren, um den Grundzustand, aber auch die Zustände bei endlichen Temperaturen bestimmen zu können, erweist es sich als sehr schwer, Ströme durch einfache Nanostrukturen exakt zu berechnen, wenn sich das System im Nichtgleichgewicht befindet [2]. Wegen dieser Schwierigkeiten werden bei der exakten Berechnung der Ströme

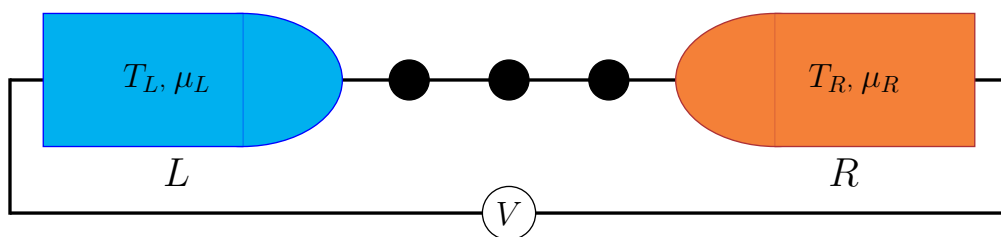


Abbildung 1.1: Nanostruktur, bestehend aus drei Gitterplätzen (schwarze Kreise), welche an die Zuleitungen L und R gekoppelt ist. Die Zuleitungen besitzen die Temperaturen T_j und die chemischen Potentiale μ_j mit $j = L, R$, wobei die Spannung durch $eV = \mu_L - \mu_R$ definiert ist.

Systeme betrachtet, bei denen sich lediglich ein Gitterplatz zwischen den Zuleitungen befindet, wie das spinlose IRLM (*interacting resonant level model*) [3] oder das SIAM (*single-impurity Anderson model*) [4]. Um die Ströme durch diese Systeme bestimmen zu können, gibt es sowohl numerische, als auch analytische Methoden wie beispielsweise die td-DMRG (*time-dependent density matrix renormalization group*) [5–7], Green'sche Funktionen im Nichtgleichgewicht [8,9],

die TEBD Methode (*time-evolving block decimation*) [10,11], die iterierte Summation von Pfadintegralen [12], die NRG Methode (*numerical renormalization group*) [13,14] und die zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie [15–18]. Auch wenn lediglich sehr kleine Nanostrukturen mit wechselwirkenden Fermionen zwischen den Zuleitungen betrachtet werden, ist die numerische Berechnung der Ströme durch die Nanostruktur mit den oben genannten Methoden sehr aufwendig.

In der ersten Hälfte dieser Arbeit befassen wir uns mit wechselwirkungsfreien, aber auch wechselwirkenden Elektronensystemen, bei denen wir sowohl den Ladungs-, als auch den Energiestrom durch die zentrale Nanostruktur berechnen. Im zweiten Kapitel betrachten wir zunächst wechselwirkungsfreie Systeme mit der Struktur aus Abb. 1.1. Um die Ströme durch die zentrale Struktur (Streuregion) zu berechnen, verwenden wir die Zeitentwicklung des quantenmechanischen Dichteoperators und als Alternative hierzu den Landauer-Büttiker-Formalismus, welche identische Ergebnisse liefern.

Im dritten Kapitel betrachten wir Systeme mit der gleichen Struktur wie bei den wechselwirkungsfreien Systemen, wobei in der Streuregion die Elektronen nun miteinander wechselwirken. Die Wechselwirkung der Elektronen behandeln wir mit der Hartree-Fock-Näherung, was eine zeitsparende Alternative zu den oben genannten Methoden darstellt, um die Effekte der Wechselwirkung auf die Ströme abschätzen zu können.

Mit den Methoden und den Erkenntnissen, welche wir bei der Betrachtung des thermoelektrischen Transports durch Nanostrukturen im zweiten und dritten Kapitel gewonnen haben, können die Leistung und der Wirkungsgrad von Nanowärmemaschinen berechnet werden. Das Ziel dieser Wärmemaschinen ist, durch eine geeignete Konfiguration der Maschine möglichst effizient aus Wärme elektrischen Strom zu erzeugen [19–21]. Generell hängt die Funktion solcher Wärmemaschinen von der Kombination aus Ladungs- und Wärmetransport durch Nanostrukturen ab, wobei diese Nanostrukturen an makroskopische Zuleitungen gekoppelt sind. In den letzten Jahren wurden viele Entwürfe einer möglichen Wärmemaschine diskutiert, wobei die meisten Vorschläge aus Systemen von Quantenpunkten¹ als Streuregion zwischen den Zuleitungen bestehen [23–33].

Um die Funktionsweise einer Wärmemaschine besser verstehen zu können, diskutieren wir im vierten Kapitel zunächst den Seebeck-Effekt. Zudem stellen wir mit Hilfe von linearen Transportkoeffizienten einfache Zusammenhänge zwischen den Ladungs- und Wärmeströmen und Größen wie dem elektrischen und thermischen Leitwert her.

Im fünften Kapitel gehen wir speziell auf die Wärmemaschine aus Abb. 1.2 ein, welche von Jordan *et al.* [21] vorgeschlagen wurde. Die Wärmemaschine besteht aus den beiden Zulei-

¹ Ein Quantenpunkt (engl. *quantum dot*) ist eine Struktur, typischerweise bestehend aus Halbleitermaterialien, welche die Bewegungsfreiheit der Elektronen in alle Richtungen einschränkt. Somit besitzen die Elektronen in Quantenpunkten diskrete Energieniveaus [22].

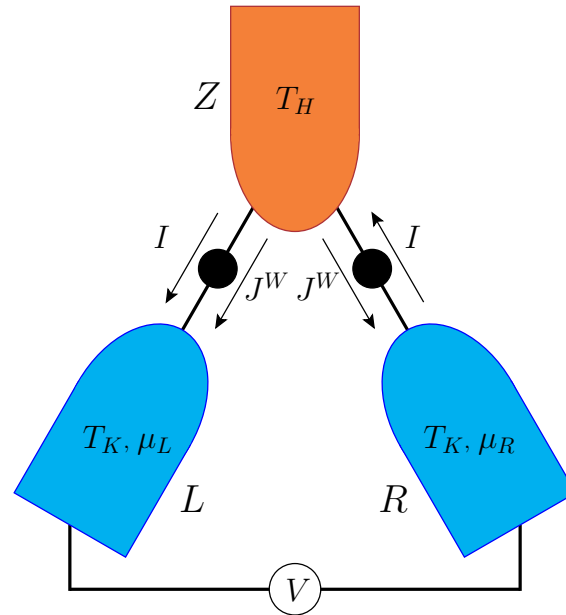


Abbildung 1.2: Nanowärmemaschine mit drei Zuleitungen, welche von Jordan *et al.* [21] vorgestellt wurde. Die blauen Zuleitungen besitzen die tiefere Temperatur T_K , das rote Reservoir besitzt die höhere Temperatur T_H . Die Zuleitungen sind mit dem Reservoir über einzelne Quantenpunkte (schwarze Kreise) verbunden. Zudem sind die Richtungen der Ladungsströme I und der Wärmeströme J^W durch die Pfeile dargestellt.

tungen L und R mit der tieferen Temperatur T_K und dem Reservoir Z mit der höheren Temperatur T_H . Die Zuleitungen und das Reservoir sind jeweils über einen einzelnen Quantenpunkt (schwarze Kreise) miteinander verbunden. Durch ein asymmetrisches Potential an diesen Quantenpunkten, wird ein Ladungsstrom I von R nach Z und Z nach L erzeugt. Zudem fließt jeweils ein Wärmestrom J^W vom heißeren Reservoir in die kälteren Zuleitungen.

In der Publikation [21] wurde die inkohärente Wärmemaschine betrachtet, bei der die beiden Quantenpunkte räumlich sehr weit voneinander entfernt sind und dadurch der direkte Ladungsstrom von L nach R unterdrückt wird. Da sich aber die Frage aufdrängt, ob sich die inkohärente Wärmemaschine überhaupt technisch umsetzen lässt, werden wir uns im fünften Kapitel mit der kohärenten Wärmemaschine auseinandersetzen, bei der der Ladungsstrom von L nach R nicht unterdrückt wird. Hier werden wir feststellen, dass die kohärente und inkohärente Wärmemaschinen nahezu die gleichen Leistungen und Wirkungsgrade erzielen.

Abschließend befassen wir uns mit der Frage, ob sich die Leistung und der Wirkungsgrad der Wärmemaschine steigern lassen, indem man die einzelnen Quantenpunkte zwischen den Zuleitungen und dem Reservoir durch spezielle Strukturen mit gekoppelten Quantenpunkten ersetzt. Interessanterweise reichen bereits Strukturen aus sehr wenigen Quantenpunkten, um die Effizienz der Wärmemaschine in etwa zu verdoppeln.

2 Das Tight-Binding-Modell

Wir betrachten in dieser Arbeit den thermoelektrischen Transport durch Modelle mit mindestens zwei Zuleitungen (Leads), die durch einen zentralen Bereich (Streuregion) miteinander verbunden sind und jeweils verschiedene chemische Potentiale und Temperaturen haben können. Es werden also Systeme behandelt, die sich im Nichtgleichgewicht befinden. In diesem Kapitel befassen wir uns zunächst mit eindimensionalen und wechselwirkungsfreien Elektronensystemen in einer Dimension (s. Abb. 2.1). Um in diesen Systemen die Ladungs- bzw. Energieströme bestimmen zu können, werden wir den Hamiltonoperator im Tight-Binding-Modell als Grundlage verwenden. Dazu werden wir zwei verschiedene Methoden näher betrachten: Als erstes werden wir eine Zeitentwicklung des großkanonischen Dichteoperators des Systems durchführen, um so die Stromdichten in Abhängigkeit von der Zeit bestimmen zu können, was uns dann die stationären Ströme liefert. Zum anderen benutzen wir den Landauer-Büttiker-Formalismus um die Ladungs- und Energieströme zu erhalten. Mit dem Formalismus kann zudem veranschaulicht werden, wie die Energiebänder der Zuleitungen und die Transmission durch den zentralen Bereich die Ströme durch die Streuregion beeinflussen. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels vergleichen wir die beiden Methoden und werden herausfinden, dass die Werte der stationären Ströme nahezu identisch sind¹.

2.1 Hamiltonoperator im Tight-Binding-Modell

In dieser Arbeit werden wir die Systeme mit einem Hamiltonoperator im Tight-Binding-Modell mit und ohne Wechselwirkung beschreiben. Zunächst stellt sich aber die folgende Frage:

2.1.1 Warum Tight-Binding?

Wolfgang Nolting leitet sein Buch Grundkurs für Theoretische Physik 7 mit dem Absatz ein: *„Die physikalische Welt besteht aus wechselwirkenden Viel-Teilchen-Systemen. Deren exakte Beschreibung erfordert die Lösung von entsprechenden Viel-Teilchen-Schrödinger-Gleichungen, was*

¹ Die Ergebnisse in diesem Kapitel beruhen zum Teil auf den Referenzen [34] und [45].

allerdings in der Regel unmöglich ist. Die Aufgabe der Theoretischen Physik besteht deshalb darin, Konzepte zu entwickeln, mit deren Hilfe ein Viel-Teilchen-Problem physikalisch vernünftigt approximativ gelöst werden kann. “ [35].

In der Festkörperphysik betrachten wir also makroskopische Systeme, die im Allgemeinen aus sehr vielen Teilchen ($\approx 10^{24}$) bestehen. Besitzen diese Systeme eine periodische Struktur, spricht man von Kristallen, welche sich im Allgemeinen aus Gitterionen und Valenzelektronen zusammensetzen. Die Gitterionen bestehen aus positiv geladenen Atomkernen, an denen die negativ geladenen Rumpfelektronen gebunden sind. Die Valenzelektronen sind die Teilchen, die bei einem Festkörper mit Leitungscharakteristik für den Teilchenstrom verantwortlich sind. Diese Valenzelektronen gehören im Allgemeinen verschiedenen Orbitalen an, was in einem Festkörper mit einem periodischen Gitter bedeutet, dass es mehrere Energiebänder² gibt. Dazu kommen noch Wechselwirkungen zwischen Ionen und Ionen, Ionen und Elektronen und natürlich Elektronen mit anderen Elektronen. Wenn man sich noch vor Augen führt, dass ein typischer makroskopischer Festkörper $\approx 10^{24}$ Atome besitzt, ist die genaue Berechnung solcher Systeme selbst mit den leistungsstärksten Computern nicht möglich.

Eine Methode, alle Energiebänder der Valenzelektronen eines Kristalls zu betrachten, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu berechnen und die energetisch günstigste Position der Gitterionen zu finden, bietet die Dichtefunktionaltheorie (DFT), welche aber nur numerisch durchgeführt werden kann. Betrachtet man mit der DFT allerdings den thermoelektrischen Transport durch eine Nanostruktur, ist die Berechnung sehr zeitintensiv.

Möchte man den thermoelektrischen Transport analytisch berechnen, ist man auf Näherungen angewiesen. Eine mögliche Herangehensweise ist, dass nur ein Energieband betrachtet wird, nämlich jenes, was am nächsten zur Fermi-Kante³ ist. Zwei weitere Näherungen, die wir zunächst benutzen werden, ist zum einen die Vernachlässigung der Wechselwirkung der Elektronen mit den Ionen und auch anderen Elektronen, zum anderen nehmen wir an, dass das Kristallgitter unbeweglich ist. Mit diesen Näherungen kommt hierfür das Tight-Binding-Modell in Frage.

Beim Tight-Binding-Modell hat die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons ein Maximum auf einem Gitterplatz des Systems. Das hat zur Folge, dass die Bewegung der Elektronen von einem Gitterplatz zum nächsten eingeschränkt wird. Mit dem Tight-Binding-Modell kann so ein einzelnes Energieband eines Kristalls, aber auch Systeme aus (durch Tunneln) gekoppelten Quantendots beschrieben werden, weswegen wir uns in dieser Arbeit auf dieses Modell beschränken.

2 Die Energieniveaus der Elektronen eines unendlich großen idealen Kristalls (periodisch wiederholendes Gitter) können durch kontinuierliche Funktionen (Energiebänder) beschrieben werden.

3 Die Fermi-Kante ist das höchste Energieniveau, welches ein Elektron in einem System im Grundzustand erreichen kann.

Der Tight-Binding-Hamiltonoperator im Besetzungszahlformalismus ist im Allgemeinen wie folgt definiert [36]:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i. \quad (2.1)$$

Bei der ersten Summe wird mit $\langle ij \rangle$ nur über alle nächsten Nachbarn j eines Gitterplatzes i summiert (es wird nicht zusätzlich über alle Nachbarn des Gitterplatzes j summiert). Hierbei ist der Hoppingparameter t_{ij} eine Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Wechseln eines Elektrons von Platz j nach i . Der zweite Term beschreibt ein Potential (Gatespannung) ε_i , welches jeweils auf jedem Gitterplatz angelegt werden kann. Des Weiteren sind $\hat{c}_{i, \sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{j, \sigma}$) die Erzeugungs- (Vernichtungs-)operatoren, welche ein Teilchen auf Platz i (j) erzeugen (vernichten), und der Besetzungszahloperator ist gegeben als $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma}$. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen die Antikommutatorrelationen mit

$$\begin{aligned} \left[\hat{c}_{i, \sigma}^\dagger, \hat{c}_{j, \sigma'} \right]_+ &= \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma'} + \hat{c}_{j, \sigma'} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger = \delta_{i, j} \delta_{\sigma, \sigma'} \\ \left[\hat{c}_{i, \sigma}^\dagger, \hat{c}_{j, \sigma'}^\dagger \right]_+ &= 0 = \left[\hat{c}_{i, \sigma}, \hat{c}_{j, \sigma'} \right]_+ \end{aligned} \quad (2.2)$$

und dem Kronecker-Delta

$$\delta_{i, j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}. \quad (2.3)$$

Der Index $\sigma = \uparrow, \downarrow$ in Gl. (2.1) beschreibt den Spin der Elektronen. Da wir aber zunächst keine Spinwechselwirkungen oder externe magnetische Felder betrachten, bedeutet der Index lediglich, dass zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin auf einem Gitterplatz sein können, was das Pauli-Prinzip andernfalls verbieten würde. Damit gilt für die Stromdichten, dass diese verdoppelt werden. Weil also der Spinindex im Tight-Binding-Modell (Gl. (2.1)) im thermoelektrischen Transport nur einen Faktor 2 ausmacht, werden wir zunächst spinlose Elektronen betrachten, und somit die Summation über σ weglassen.

Im nächsten Abschnitt werden wir uns mit einer eindimensionalen Kette ein konkretes Beispiel für ein Tight-Binding-Modell näher ansehen.

2.1.2 Die eindimensionale Kette

Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst den Hamiltonoperator für ein eindimensionales, nichtwechselwirkendes Elektronensystem in der Tight-Binding-Näherung (siehe Abb. 2.1). Die zwei Zuleitungen mit den Hoppingparametern t_L und t_R , bei denen ein zusätzliches Potential ε_L und ε_R angelegt werden kann, werden mit den Parametern t'_L und t'_R mit der Streuregion verbunden, bei der die Hoppingparameter t_j und die Gatespannungen ε_j unabhängig voneinander gewählt werden können. Des Weiteren besitzt die Streuregion

N_S Gitterplätze, die linke Zuleitung soll N_L Plätze haben und endet bei Gitterplatz a und das rechte Lead beginnt bei Platz b und besitzt insgesamt N_R Plätze. Demzufolge hat das System $N_{\text{ges}} = N_L + N_S + N_R$ Gitterplätze. Damit erhalten wir die Hamiltonoperatoren für die einzelnen Segmente des Systems

$$\hat{H}_L = -t_L \sum_{j=1}^{a-1} \left(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.} \right) + \varepsilon_L \sum_{j=1}^a \hat{n}_j \quad (2.4)$$

$$\hat{H}_R = -t_R \sum_{j=b}^{N_{\text{ges}}-1} \left(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.} \right) + \varepsilon_R \sum_{j=b}^{N_{\text{ges}}} \hat{n}_j \quad (2.5)$$

$$\hat{H}_S = - \sum_{j=a+1}^{b-2} t_j \left(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.} \right) + \sum_{j=a+1}^{b-1} \varepsilon_j \hat{n}_j \quad (2.6)$$

$$\hat{H}_{LS} = -t'_L \left(\hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a + \text{h.c.} \right) \quad (2.7)$$

$$\hat{H}_{SR} = -t'_R \left(\hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} + \text{h.c.} \right), \quad (2.8)$$

wobei \hat{H}_L und \hat{H}_R die linke bzw. rechte Zuleitung, \hat{H}_S die Streuregion und \hat{H}_{LS} (\hat{H}_{SR}) die Ankopplung der Leads an die Streuregion beschreiben. Damit ist der gesamte Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{ges}} = \hat{H}_L + \hat{H}_{LS} + \hat{H}_S + \hat{H}_{SR} + \hat{H}_R. \quad (2.9)$$

In Abschnitt 2.1.1 haben wir bereits erläutert, dass beim Tight-Binding-Modell in einer Dimension lediglich ein Energieband der Elektronen betrachtet wird. Um die Energiebänder der Leads aus Gl. (2.4) und (2.5) zu berechnen, wird üblicherweise eine Fourier-Transformation des Hamiltonoperators durchgeführt, da das Tight-Binding-Modell mit gleichen Hoppingparametern und Gatepotential den Vorteil hat, im Fourier-Raum diagonal zu sein. Bei der

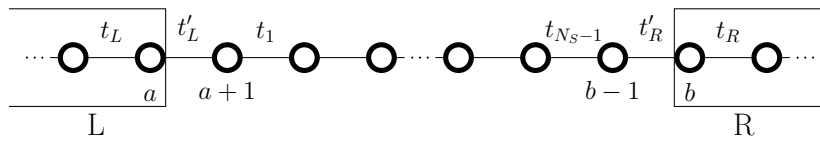


Abbildung 2.1: Eindimensionales Modell in der Tight-Binding-Näherung mit zwei Zuleitungen und einer Streuregion mit N_S Gitterplätzen, welche mit den Hoppingparametern t'_L und t'_R verbunden sind. In den Zuleitungen gibt es jeweils nur ein Hoppingparameter t_L bzw. t_R , in der Streuregion können die Hoppingparameter willkürlich gewählt werden.

Fourier-Transformation ersetzen wir die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren in den Hamiltonoperatoren der Leads durch

$$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{N_{L,R}}} \sum_k e^{ikja} \hat{c}_k \quad (2.10)$$

$$\hat{c}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_{L,R}}} \sum_k e^{-ikja} \hat{c}_k^\dagger, \quad (2.11)$$

wobei hier über die Wellenzahlen k summiert wird und a die Gitterkonstante ist. Damit erhalten wir für die Hamiltonoperatoren der Zuleitungen

$$\hat{H}_{L,R} = \sum_{k_{L,R}} [-2t_{L,R} \cos(k_{L,R}a) + \varepsilon_{L,R}] \hat{c}_{k_{L,R}}^\dagger \hat{c}_{k_{L,R}} \quad (2.12)$$

und die Eigenenergien

$$E_{k_{L,R}} = -2t_{L,R} \cos(k_{L,R}a) + \varepsilon_{L,R}. \quad (2.13)$$

Mit den Eigenenergien können wir auch die Gruppengeschwindigkeit $v_{k_{L,R}}$ der Leads wie folgt angeben:

$$v_{k_{L,R}} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_{k_{L,R}}}{dk_{L,R}} = \frac{2t_{L,R}a}{\hbar} \sin(k_{L,R}a), \quad (2.14)$$

welche wir im späteren Verlauf der Arbeit noch benötigen werden. Den Gitterabstand a setzen wir in dieser Arbeit auf „1“.

Das Energieband (Dispersionsrelation) eines Systems mit gleichen Hoppingparametern $t_{L,R}$ ist also die Kosinusfunktion, die um den Wert $\varepsilon_{L,R}$ verschoben ist. Die Wellenzahl k kann nun an beliebige Randbedingungen angepasst werden. Wählen wir beispielsweise $t'_L = t'_R = 0$ besteht unser System (Abb 2.1) aus drei isolierten Bereichen (Zuleitungen und Streuregion). So können wir eine Zuleitung als unendlich tiefen Potentialtopf sehen, was als feste Randbedingung bezeichnet wird. Die Wellenzahl ist in diesem Fall gegeben als $k_{L,R} = n\pi/(N_{L,R} + 1)$, wobei $n = 1, \dots, N_{L,R}$. Nehmen wir die Leads als sehr groß an, betrachten wir mit festen Randbedingungen also ein Energieband als halbe Kosinusfunktion mit $0 < k_{L,R} < \pi$, wobei die Energieniveaus der Elektronen nicht entartet sind.

Die Zuleitungen besitzen nur ein Energieband, weil wir die Hoppingparameter und Gate-Spannungen an jeder Stelle gleich gewählt haben. Betrachtet man aber beispielsweise ein Lead mit zwei verschiedenen Hoppingparametern, die sich periodisch abwechseln, erhält man zwei Energiebänder mit einer Energielücke dazwischen [37]. Am Ende dieser Arbeit werden wir kurz auf zwei- und dreidimensionale Systeme eingehen, bei denen wir auch mehrere Energiebänder in den Zuleitungen betrachten.

Im nächsten Abschnitt werden wir uns mit den Ladungs- und Energiestromdichten auseinandersetzen und einen Ausdruck für die Transmission der Streuregion finden.

2.2 Thermoelektrischer Transport

Um den thermoelektrischen Transport durch die Streuregion in Abb. 2.1 beschreiben zu können, betrachten wir in diesem Abschnitt die Ladungs- und Energiestromdichten (j^C und j^E) und damit die zugehörigen Ladungs- und Energieströme (I und J^E) genauer. Im ersten Abschnitt betrachten wir zunächst die Ladungsstromdichte und werden herausfinden, dass wir dadurch nicht nur den Ladungsstrom bestimmen können, sondern auch die Transmission durch eine Streuregion definieren können. Im zweiten Abschnitt finden wir einen Ausdruck für die Energiestromdichte und damit auch für den Energiestrom.

2.2.1 Ladungsstromdichte und Transmission

Die Ladungsstromdichte am Gitterplatz l kann in dreidimensionalen Systemen im Allgemeinen mit der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{n}_l \rangle + \nabla j_l^C = 0. \quad (2.15)$$

ausgedrückt werden. Die Divergenz der Ladungsstromdichte ist in einer Dimension die Ableitung in x -Richtung und lässt sich wegen der Diskretheit des Tight-Binding-Modells als $dj_l^C/dx = (j_l^C - j_{l-1}^C)/a$ schreiben. Den Gitterabstand a haben wir zwar in dieser Arbeit auf „1“ gesetzt, man erkennt aber mit dieser Schreibweise, dass es sich im kontinuierlichen Fall ($a \rightarrow 0$) um die Ableitung der Stromdichte nach dem Ort handelt. An der eindimensionalen Ableitung kann man auch leicht erkennen, dass die zeitliche Ableitung des Erwartungswerts des Besetzungszahloperators zwei Ladungsstromdichten zur Folge hat: zwischen den Gitterplätzen $l-1$ und l die Dichte j_{l-1}^C und zwischen den Gitterplätzen l und $l+1$ die Dichte j_l^C .

Die zeitliche Ableitung des Erwartungswerts des Besetzungszahloperators lässt sich mit dem Ehrenfest'schen Theorem

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{O} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{O}]_- \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{O} \right\rangle \quad (2.16)$$

berechnen, wobei hier \hat{O} ein beliebiger Operator, und $[\hat{H}, \hat{O}]_- = \hat{H}\hat{O} - \hat{O}\hat{H}$ der Kommutator ist.⁴ In Gl. (2.16) ersetzen wir nun den Operator \hat{O} durch den Besetzungszahloperator \hat{n}_l an Platz l und verwenden den Hamiltonoperator \hat{H}_{ges} aus (2.9). Zudem verschwindet der zweite Term der rechten Seite, da der Besetzungszahloperator nicht von der Zeit abhängt.

4 Wir benötigen das Theorem in dieser Arbeit noch öfter, deswegen wird es hier einmal allgemein angegeben.

Insgesamt erhalten wir für die Kontinuitätsgleichung aus (2.15)

$$\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{n}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_- \rangle = j_l^C - j_{l-1}^C. \quad (2.17)$$

Hier können wir leicht erkennen, dass der Kommutator auf der linken Seite nur Terme der Form $[\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta, \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta]_-$ enthält. Verwendet man die Vertauschungsrelationen für Fermionen aus (2.2), können wir den Kommutator im Allgemeinen wie folgt auswerten:

$$\begin{aligned} [\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta, \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta]_- &= \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta - \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \\ &= \delta_{\beta,\gamma} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\delta - \delta_{\alpha,\delta} \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\beta - \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\delta \hat{c}_\beta + \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\delta \hat{c}_\beta, \\ &= \delta_{\beta,\gamma} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\delta - \delta_{\alpha,\delta} \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\beta \end{aligned} \quad (2.18)$$

wobei hier $\delta_{\alpha,\beta}$ das Kronecker-Delta aus (2.3) ist. Aus dem allgemeinen Kommutator kann man herauslesen, dass zwei Besetzungszahloperatoren ($\alpha = \beta$ und $\gamma = \delta$) miteinander vertauschen, also $[\hat{n}_\alpha, \hat{n}_\gamma]_- = 0$ gilt. Wertet man nun den Kommutator $[\hat{n}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_-$ mit Hilfe von Gl. (2.18) aus, erhält man für die Ladungsstromdichte zwischen Platz l und $l+1$

$$j_l^C = \frac{it_l e}{\hbar} \left(\langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle - \text{h.c.} \right). \quad (2.19)$$

Beim positiven Term des Stroms wird zuerst ein Teilchen auf Platz $l+1$ erzeugt und auf Platz l vernichtet, weshalb die positive Stromrichtung der Teilchenstromdichte von links nach rechts gegeben ist. Weil aber die Elektronen negativ geladen sind, geht die Ladungsstromdichte mit der Elementarladung $e < 0$ in die umgekehrte Richtung. Es muss also immer beachtet werden, ob von der Teilchen- oder der Ladungsstromdichte gesprochen wird. Aus Gl. (2.19) kann man auch leicht die Einheit „Ladung pro Zeit“ der Stromdichte herauslesen, da die Erwartungswerte von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dimensionslos sind, der Hoppingparameter t_l die Einheit „Energie“ besitzt und \hbar durch „Energie mal Zeit“ gegeben ist.

Bei späteren numerischen Berechnungen werden wir ausschließlich den Ladungsstrom I betrachten, welcher in drei Dimensionen gegeben ist als das Integral der Ladungsstromdichte über die Fläche A des Leiters

$$I = \int dA j^C. \quad (2.20)$$

In einer Dimension sind also die Stromdichten gleich den Strömen. Weil wir in dieser Arbeit nur Systeme betrachten, die eindimensional sind oder auf eindimensionale Systeme transformiert werden können, wird dies für die ganze Arbeit gelten.

Die Ströme werden wir zwischen den Leads und der Streuregion berechnen. Betrachtet man da-

zu als Beispiel das System in Abb. 2.1, erhalten wir die Ladungsströme

$$\begin{aligned} I_{LS} &= \frac{it'_L e}{\hbar} \left(\langle \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a \rangle - \text{h.c.} \right) \\ I_{SR} &= \frac{it'_R e}{\hbar} \left(\langle \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} \rangle - \text{h.c.} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Später werden wir die Ladungsströme auf die Zeit aufrufen und feststellen, dass die Ströme leicht fluktuieren. Deshalb bilden wir den Mittelwert der beiden Ströme

$$I = \frac{I_{LS} + I_{SR}}{2}, \quad (2.22)$$

damit ein genauerer Wert abgelesen werden kann.

Die Ladungsstromdichten geben nicht nur den Strom durch eine Streuregion an, man kann mit ihnen auch die Transmission durch die zentrale Region bestimmen. Die Transmission eines Teilchens mit der Energie E_{k_L} von der linken Zuleitung in die rechte ist mit

$$\mathcal{T}(E_{k_L}) = \left| \frac{j_R^C}{j_L^C} \right| \quad (2.23)$$

definiert [38].

Zu beachten ist, dass j_L^C die auf die Streuregion zulaufende Ladungsstromdichte in der linken Zuleitung und j_R^C die von der Streuregion weglauende Stromdichte im rechten Lead ist.

Im nächsten Abschnitt berechnen wir, analog zur Ladungsstromdichte, die Energiestromdichte durch eine Streuregion.

2.2.2 Energiestromdichte

Wir betrachten zunächst auf einem Gitterplatz l die Energiestromdichte und werden dann diese Ergebnisse benutzen, um die Stromdichte durch eine Streuregion berechnen zu können. Die Energiestromdichte am Platz l wird, analog zur Ladungsstromdichte, durch die zeitliche Ableitung des Energieerwartungswerts an diesem Platz beschrieben. Dazu benutzen wir wieder die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{h}_l\rangle + \nabla j_l^E = 0, \quad (2.24)$$

wobei die Energie durch den Hamiltonoperator an einem Platz mit

$$\hat{h}_l = \varepsilon_l \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l - \frac{t_l}{2} \left(\hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l + \text{h.c.} \right) - \frac{t_{l-1}}{2} \left(\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l-1} + \text{h.c.} \right) \quad (2.25)$$

gegeben ist.⁵ Die Ableitung nach der Zeit des Erwartungswerts der Energie kann durch das Ehrenfest-Theorem ((2.16)) ausgewertet werden, und man erhält den Kommutator

$$-\frac{d}{dt}\langle\hat{h}_l\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{h}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_-\rangle = \nabla j_l^E. \quad (2.26)$$

Der zweite Term des Ehrenfest-Theorems fällt weg, da \hat{h}_l nicht von der Zeit abhängt und man erhält mit Gl. (2.18)

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{h}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_-\rangle &= \frac{1}{2e} (\varepsilon_{l+1} + \varepsilon_l) j_l^C - \frac{i}{2\hbar} t_l t_{l+1} \left(\langle\hat{c}_{l+2}^\dagger \hat{c}_l\rangle - \text{h.c.} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2e} (\varepsilon_{l-1} + \varepsilon_l) j_{l-1}^C + \frac{i}{2\hbar} t_{l-1} t_{l-2} \left(\langle\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l-2}\rangle - \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (2.27)$$

wobei hier bereits die Terme der Form $\langle\hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l\rangle$ in die Ladungsstromdichten j_l^C und j_{l-1}^C aus Gl. (2.19) zusammengefasst wurden. Zudem fällt auf, dass im Gegensatz zur Ladungsstromdichte auch Terme mit Hopping zu übernächsten Nachbarn existieren. Deswegen ist es bei der Energiestromdichte nicht so einfach, die Divergenz ∇j_l^E aus der Kontinuitätsgleichung auszuwerten, da zu den Termen aus Gl (2.27) eigentlich noch ein Term von Gitterplatz $l-1$ auf Platz $l+1$ hinzukommt, wenn man die gesamte Energiedichte zwischen Platz l und $l+1$ berechnen möchte.

Wir werden später nur noch die Energieströme J^E betrachten, welche analog zu den Ladungsströmen mit

$$J^E = \int dA j^E \quad (2.28)$$

gegeben sind und auch hier für eindimensionale Systeme $J^E = j^E$ gilt.

⁵ Die Definition von \hat{h}_l ist nicht eindeutig. Neben der hier gewählten symmetrischen Form sind auch asymmetrische Versionen möglich.

Die Energieströme werden wir zwischen den Zuleitungen und der Streuregion berechnen. Betrachtet man dafür das System aus Abb. 2.1, besteht der Energiestrom vom linken Lead in das Streuzentrum demnach aus drei Termen. Einmal von Platz a zu $a + 1$, zudem zwei Terme mit dem übernächsten Nachbar-Hopping, von $a - 1$ zu $a + 1$ und a zu $a + 2$. Insgesamt erhalten wir dann für den Energiestrom vom linken Lead in die Streuregion

$$J_{LS}^E = \frac{1}{2e} (\varepsilon_L + \varepsilon_1) I_{LS} - \frac{i}{2\hbar} \left[t'_L t_1 (\langle \hat{c}_{a+2}^\dagger \hat{c}_a \rangle - \text{h.c.}) + t_L t'_L (\langle \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_{a-1} \rangle - \text{h.c.}) \right], \quad (2.29)$$

und analog für den Energiestrom von der Streuregion in das rechte Lead

$$J_{SR}^E = \frac{1}{2e} (\varepsilon_{N_S} + \varepsilon_R) I_{SR} - \frac{i}{2\hbar} \left[t_{N_S-1} t'_R (\langle \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-2} \rangle - \text{h.c.}) + t'_R t_R (\langle \hat{c}_{b+1}^\dagger \hat{c}_{b-1} \rangle - \text{h.c.}) \right]. \quad (2.30)$$

Wie beim Ladungsstrom berechnen wir auch hier den Mittelwert der beiden Ströme J_{LS}^E und J_{SR}^E mit

$$J^E = \frac{J_{LS}^E + J_{SR}^E}{2}. \quad (2.31)$$

Zudem ist der Energiestrom J^E positiv in der Richtung von links nach rechts.

Im nächsten Abschnitt diskutieren wir, wie die Erwartungswerte der Form $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ konkret berechnet werden können, um den Ladungs- und Energiestrom numerisch zu bestimmen.

2.3 Zeitentwicklung des Dichteoperators

Wir haben nun Ausdrücke gefunden, wie wir den Ladungs- und Energiestrom in eindimensionalen und wechselwirkungsfreien Elektronensystemen (s. Abb. 2.1) berechnen können, die Erwartungswerte der Form $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ enthalten. In diesem Abschnitt erläutern wir, wie diese numerisch bestimmt werden können. Deshalb werden wir uns zunächst den großkanonischen Dichteoperator für das System aus Abb. 2.1 ansehen und anschließend eine Zeitentwicklung durchführen. Weil der Dichteoperator für ein System von N_{ges} Fermionen aber im Allgemeinen in einem Hilbertraum der Größe $2^{N_{\text{ges}}} \times 2^{N_{\text{ges}}}$ operiert, möchten wir für den Erwartungswert eine Herleitung präsentieren, bei der nur noch Matrizen der Größe $N_{\text{ges}} \times N_{\text{ges}}$ verwendet werden.

2.3.1 Der großkanonische Dichteoperator

Generell können Erwartungswerte von Operatoren über die Spur des (im Allgemeinen zeitabhängigen) Dichteoperators $\rho(t)$ und des Operators \hat{O}

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Sp} [\rho(t) \hat{O}] \quad (2.32)$$

bestimmt werden. Der Dichteoperator wird verwendet, um zu einem bestimmten Zeitpunkt eine Besetzung des Systems vorzugeben. Anschließend kann der Dichteoperator zeitlich entwickelt werden, um dann Erwartungswerte von Observablen bestimmen zu können. So können Informationen bestimmt werden, wie sich das System mit der Zeit verhält. Weil wir unsere Zuleitungen als sehr große Teilchen- und Wärmebäder sehen, benutzen wir zum Zeitpunkt $t = 0$ die großkanonischen Dichteoperatoren der drei separaten Systeme \hat{H}_L , \hat{H}_S und \hat{H}_R aus Gl. (2.4)-(2.6) und erhalten⁶

$$\hat{\rho}(0) = Z^{-1} e^{-\beta_L(\hat{H}_L - \mu_L \hat{N}_L)} e^{-\beta_S(\hat{H}_S - \mu_S \hat{N}_S)} e^{-\beta_R(\hat{H}_R - \mu_R \hat{N}_R)} \quad (2.33)$$

mit der Zustandssumme

$$Z = \text{Sp} \left[e^{-\beta_L(\hat{H}_L - \mu_L \hat{N}_L)} e^{-\beta_S(\hat{H}_S - \mu_S \hat{N}_S)} e^{-\beta_R(\hat{H}_R - \mu_R \hat{N}_R)} \right] \quad (2.34)$$

und der Summe der Besetzungszahloperatoren $\hat{N}_j = \sum_{k=1}^{N_j} \hat{n}_k$ in den Bereichen $j = L, S, R$. Hierbei muss beachtet werden, dass \hat{N}_j ein Operator und N_j die Anzahl der Gitterplätze des jeweiligen Bereichs darstellen. Beim Dichteoperator haben wir nun in jedem Bereich des

⁶ An diesem Punkt sollte noch erwähnt werden, dass die Operatoren \hat{H}_j die gleiche Dimension des Operators \hat{H}_{ges} aus Gl. (2.9) haben, da die Multiplikation der Exponentialfunktionen sonst keinen Sinn ergibt.

Systems die Möglichkeit eine inverse Temperatur $\beta_j = 1/k_B T_j$ und ein chemisches Potential μ_j einzustellen, wobei das chemische Potential wie folgt mit der Spannung zusammenhängt

$$\begin{aligned}\mu_L &= \mu_S + \frac{eV}{2} \\ \mu_R &= \mu_S - \frac{eV}{2}\end{aligned}\quad (2.35)$$

Das chemische Potential μ_S gibt die Fermi-Kante des Systems an, was wir meist auf $\mu_S = 0$ setzen werden.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ können beim Dichteoperator die Zuleitungen und die Streuregion verschiedene Temperaturen und chemische Potentiale haben, aber jeder Bereich befindet sich separat im Gleichgewicht, da diese noch getrennt voneinander sind. Als nächsten Schritt führen wir eine Zeitentwicklung des Dichteoperators $\rho(0)$ durch

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}_{\text{ges}}t} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}_{\text{ges}}t} = Z^{-1} e^{-i\hat{H}_{\text{ges}}t} \hat{U}(0) e^{i\hat{H}_{\text{ges}}t} = Z^{-1} \hat{U}(t), \quad (2.36)$$

wobei nun der Hamiltonoperator \hat{H}_{ges} verwendet wurde, da die Zuleitungen mit der Streuregion für Zeiten $t > 0$ verbunden sind. Zu beachten ist hier, dass t die Zeit darstellt und t_j für die Hoppingparameter im Tight-Binding-Modell stehen. Des Weiteren wurden in Gl. (2.36) der Einfachheit halber die Exponentialfunktionen des Dichteoperators $\hat{\rho}(0)$ durch $\hat{U}(0)$ und die zeitabhängigen Exponentialfunktionen und $\hat{U}(0)$ wiederum durch $\hat{U}(t)$ zusammengefasst, wobei die Zustandsumme dann $Z = \text{Sp}[\hat{U}(0)]$ ist. Weil die Spur invariant unter zyklischen Vertauschungen ist, kann der zeitabhängige Dichteoperator auch als

$$\hat{\rho}(t) = \frac{\hat{U}(t)}{\text{Sp}[\hat{U}(0)]} = \frac{\hat{U}(t)}{\text{Sp}[\hat{U}(t)]} \quad (2.37)$$

geschrieben werden. Diese Umformung von $\hat{\rho}(t)$ wird im Abschnitt 2.3.2 benötigt.

Weil der Dichteoperator im Allgemeinen in einem Hilbertraum der Dimension $2^{N_{\text{ges}}} \times 2^{N_{\text{ges}}}$ operiert, leiten wir im nächsten Abschnitt einen Ausdruck für den Erwartungswert her, welcher nur noch Matrizen der Größe $N_{\text{ges}} \times N_{\text{ges}}$ verwendet.

2.3.2 Der Erwartungswert $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle$

Kommen wir nun zurück zum Erwartungswert des Operators \hat{O} aus Gl. (2.32), der nun beschrieben werden kann als

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Sp}[\hat{U}(t)\hat{O}]}{\text{Sp}[\hat{U}(t)]}, \quad (2.38)$$

wobei wir jetzt annehmen, dass der Operator die Form

$$\hat{O} = \sum_{i,j} \hat{c}_i^\dagger o_{ij} \hat{c}_j \quad (2.39)$$

besitzt. Hier ist o_{ij} das dem Operator zugehörige Matricelement. Weil der Operator $\hat{U}(t)$ die Struktur

$$\hat{U}(t) = e^{-\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} \quad (2.40)$$

hat, ist es von Vorteil, den Operator \hat{O} auch als Exponentialfunktion schreiben zu können, damit wir im weiteren Rechenverlauf eine Vereinfachung der Gleichung durchführen können. Die Operatoren \hat{A} und \hat{B} haben die gleiche Form wie \hat{O} in Gl. (2.39). Um den Operator \hat{O} als Exponentialfunktion schreiben zu können, benutzen wir die Ableitung nach einer beliebigen skalaren Konstante λ wie folgt

$$\hat{O} = \left. \frac{d}{d\lambda} e^{\lambda \hat{O}} \right|_{\lambda=0}. \quad (2.41)$$

Weil sowohl die Spur als auch die Ableitung lineare Operationen sind und $\hat{U}(t)$ nicht von λ abhängt, können wir die Ableitung mit der Spur vertauschen und erhalten für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \frac{\left. \frac{d}{d\lambda} \text{Sp} \left[e^{-\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{\lambda \hat{O}} \right] \right|_{\lambda=0}}{\text{Sp} \left[e^{-\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} \right]} \\ &= \left. \frac{d}{d\lambda} \ln \left[\text{Sp} \left[e^{-\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{\lambda \hat{O}} \right] \right] \right|_{\lambda=0} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Im zweiten Schritt haben wir lediglich die Ableitung umgeschrieben, weswegen wir nun einen natürlichen Logarithmus in der Gleichung stehen haben. Dies war auch der Grund, weshalb wir in Gl. (2.37) den Nenner von $\text{Sp} [\hat{U}(0)]$ auf $\text{Sp} [\hat{U}(t)]$ umformten.

Bisher haben wir den Ausdruck für den Erwartungswert $\langle \hat{O} \rangle$ lediglich umgeformt. Um nun nicht mehr im Vielteilchen-Hilbertraum der Dimension $2^{N_{\text{ges}}} \times 2^{N_{\text{ges}}}$, sondern mit den zugehörigen Matrizen der Größe $N_{\text{ges}} \times N_{\text{ges}}$ rechnen zu können, verwenden wir folgenden Ausdruck aus der Publikation von Hirsch [39]

$$\text{Sp} \left[e^{-\hat{X}} e^{-\hat{Y}} \right] = \det \left[\mathbb{1} + e^{-\hat{X}} e^{-\hat{Y}} \right]. \quad (2.43)$$

Zu beachten ist, dass auf der linken Seite Operatoren mit der aus Gl. (2.39) bekannten Form stehen und auf der rechten Seite deren zugehörige Matrizen. Die Herleitung des Ausdrucks findet man im Anhang der Publikation [39]. In Gl. (2.43) stehen lediglich zwei Operatoren der Form $e^{\hat{X}}$. Mit Hilfe der Herleitung erkennt man jedoch, dass dies für eine beliebige Anzahl an Exponentialoperatoren gilt, solange diese diagonalisierbar sind.

Verwendet man nun Gl. (2.43) für den Erwartungswert von \hat{O} , so erhalten wir

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{d}{d\lambda} \ln \left[\det \left(\mathbb{1} + e^{-A} e^B e^A e^{\lambda O} \right) \right] \Big|_{\lambda=0}. \quad (2.44)$$

Mit der, aus der linearen Algebra bekannten Beziehung⁷ $\ln(\det M) = \text{Sp}(\ln M)$ können wir den Ausdruck (2.44) vereinfachen zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \text{Sp} \left[\frac{d}{d\lambda} \ln \left(\mathbb{1} + e^{-A} e^B e^A e^{\lambda O} \right) \right] \Big|_{\lambda=0}, \\ &= \text{Sp} \left[\left(\mathbb{1} + e^{-A} e^B e^A \right)^{-1} e^{-A} e^B e^A O \right] \end{aligned} \quad (2.45)$$

wobei hier beim ersten Schritt bereits die Spur mit der Ableitung vertauscht wurde. Des Weiteren wurde im zweiten Schritt die Ableitung berechnet und $\lambda = 0$ gesetzt. Benutzt man nun $U(t)$ als zugehörige Matrix des Operators $\hat{U}(t)$, erhält man für den Erwartungswert

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Sp} \left[(\mathbb{1} + U(t))^{-1} U(t) O \right]. \quad (2.46)$$

Um nun die Ladungs- und Energieströme bestimmen zu können, berechnen wir den Erwartungswert $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle$, dessen zugehöriges Matrixelement in der Dirac-Notation mit $|i\rangle\langle j|$ gegeben ist. Wir schreiben die Spur als Summe aus und erhalten

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle &= \text{Sp} \left[(\mathbb{1} + U(t))^{-1} U(t) |i\rangle\langle j| \right] \\ &= \sum_{j'} \langle j' | (\mathbb{1} + U(t))^{-1} [(\mathbb{1} + U(t)) - \mathbb{1}] |i\rangle\langle j| j' \rangle \\ &= \delta_{ij} - [(\mathbb{1} + U(t))^{-1}]_{ji} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Der Erwartungswert $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle$ wird in der Literatur auch als Green'sche Funktion für Einteilchensysteme (Single particle Green's function) bezeichnet [40].

Mit der Green'schen Funktion $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle$ können wir nun die Ladungs- und Energieströme von Systemen im Tight-Binding-Modell numerisch bestimmen, was wir im nächsten Abschnitt diskutieren werden.

⁷ Bedingung für den Ausdruck ist, dass die Matrix M diagonalisierbar sein muss, was allerdings im Beweis für Gl. (2.43) bereits vorausgesetzt wurde.

2.3.3 Numerische Ergebnisse der Zeitentwicklung

In diesen Abschnitt betrachten wir einige Beispiele für das System aus Abb. 2.1 und berechnen hierfür den Ladungs- und Energiestrom I und J^E durch die Streuregion.

	Einheiten	Typische Werte
Energie ($\varepsilon_j, eV, k_B T$)	t_0	$\sim 1 \text{ eV}$
Zeit t	$\tau = \frac{\hbar}{t_0}$	$\sim 10^{-15} \text{ s}$
Ladungsstrom I	$I_0 = \frac{et_0}{h}$	$\sim 10^{-5} \text{ A}$
Energie-/Wärmestrom $J^{E,W}$	$J_0^{E,W} = \frac{t_0^2}{h}$	$\sim 10^{-5} \frac{\text{J}}{\text{s}}$

Tabelle 2.1: Hier sind die jeweiligen Messgrößen in Abhängigkeit vom Hoppingparameter t_0 angegeben, welche in den nachfolgenden Abbildungen verwendet werden. Zusätzlich sind typische Werte der Messgrößen angegeben, wenn man von einem Energieband der Größe $\sim 1 \text{ eV}$ ausgeht.

Weil bereits bei solch einem kleinen System viele Parameter variiert werden können, legen wir nun einige davon fest. Die Hoppingparameter in den Zuleitungen sollen mit $t_0 = t_L = t_R$ die Gleichen sein, zudem nehmen wir kein Potential in den Leads an ($\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$), was dann bedeutet, dass die Energiebänder in den Zuleitungen identisch sind. Welche Effekte mit verschiedenen Energiebändern auftreten, lässt sich leicht mit der Landauer-Büttiker-Formel erklären und wird daher im Abschnitt 2.4 diskutiert. Die Länge der Zuleitungen setzen wir mit jeweils 100 Gitterplätzen fest und die Streuregion besteht der Einfachheit halber aus zwei Gitterplätzen, da wir beim Energiestrom auch die Terme mit übernächsten Nachbar Hopping betrachten möchten. Bei nur einem Gitterplatz im zentralen Bereich würden Teile des Energiestroms die Streuregion einfach „überspringen“. Damit setzt sich unser System mit den Leads aus $N_{\text{ges}} = 202$ Gitterplätzen zusammen. Des Weiteren benutzen wir für den zentralen Bereich den Hoppingparameter $t_S = t_j$ und das Potential $\varepsilon_S = \varepsilon_j$. Als Anbindung zu den Leads verwenden wir die Parameter $t' = t'_L = t'_R$.

Weil wir ein mikroskopisches System betrachten, ist es unübersichtlich, beispielsweise die Ladungsströme in Einheiten von Ampere $[A]$ anzugeben. Deshalb schreiben wir in allen Grafiken die Energien wie Gatespannung ε_j , Temperatur $k_B T_j = 1/\beta_j$ oder die Spannung eV in Einheiten des Hoppingparameters t_0 der Zuleitungen. In Tabelle 2.1 kann man sehen, wie sich dies auf die Zeit und die Ströme auswirkt. Zu beachten ist hier, dass in der Literatur der Ladungsstrom meist in Einheiten $[et_0/h]$ angegeben wird und nicht $[et_0/\hbar]$. Weil wir in

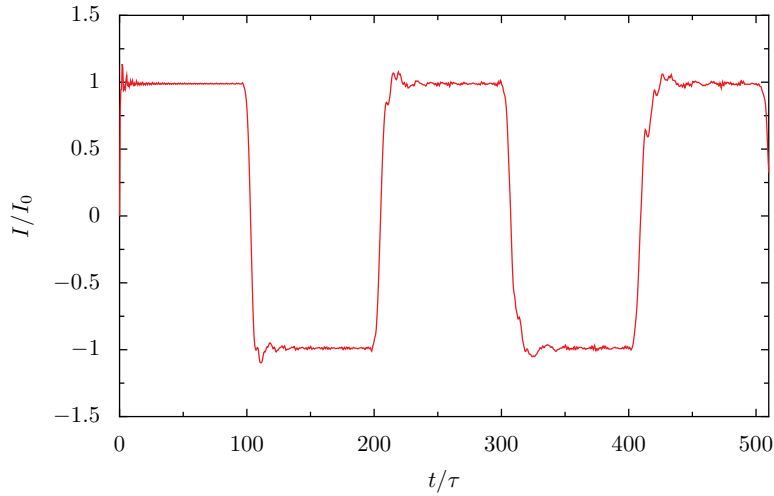


Abbildung 2.2: Einige Perioden des Ladungsstroms I/I_0 aufgetragen auf die Zeit t/τ für ein ungestörtes System mit $t' = t_0$ und $\varepsilon_S = 0$, für tiefe Temperaturen $\beta_{L,R} = 150/t_0$ und einer Spannung von $eV = t_0$.

späteren Kapiteln auch Ergebnisse mit anderen Arbeiten vergleichen, benutzen wir hier die gleiche Notation.

Als Erstes werden wir das Verhalten des Ladungsstroms über längere Zeiten genauer ansehen. Dazu betrachten wir ein ungestörtes System mit $t' = t_0$ und $\varepsilon_S = 0$ bei einer Spannung $eV = t_0$ und einer inversen Temperatur von $\beta_{L,R} = 150/t_0$. Weil wir wissen, dass das Energieband der Zuleitungen eine Größe von $4t_0$ besitzt, können wir daher von tiefen Temperaturen sprechen.

In Abb. 2.2 können wir den Ladungsstrom, aufgetragen gegen die Zeit für mehrere Perioden sehen. Man erkennt, dass der Strom circa alle 100 Zeitschritte die Richtung ändert, also im System hin- und herfließt. Die Plateaus des Stroms werden mit höheren Zeiten immer ungenauer, was auf Interferenzeffekte zurückzuführen ist. Deswegen werden wir in dieser Arbeit jeweils nur das erste Plateau der Ströme betrachten, um den stationären Strom durch die Streuregion bestimmen zu können.

Nun stellt sich die Frage, warum eine Periode des Ladungsstroms 100 Zeitschritte benötigt. Man kann dies mit der Gruppengeschwindigkeit der Elektronen in einem Lead aus Gl. (2.14) begründen. Betrachtet man klassisch, dass ein Elektron in der linken Zuleitung auf Platz a des Systems aus 2.1 sitzt, kann es sich entweder nach rechts in die Streuregion oder nach links bewegen. Falls es sich nach links bewegt, durchquert es zweimal das linke Lead⁸, bevor es die Streuregion erreichen kann. Für ein Elektron mit der Wellenzahl $k_L a = 0.5\pi$ (an der Fermi-Kante des Systems) bedeutet das für die Geschwindigkeit $v_{k_L} = 2t_0 a / \hbar$, was ausgedrückt für

⁸ Das Elektron wird am Ende des Leads reflektiert, deshalb legt es den Weg von $2N_L$ Gitterplätzen zurück

die Zeit

$$\Delta t = \frac{2N_L}{v_{k_L}} = 100\tau \quad (2.48)$$

ergibt. Also erhalten wir für Δt die 100 Zeitschritte, die wir auch im Graphen 2.2 erkennen können.

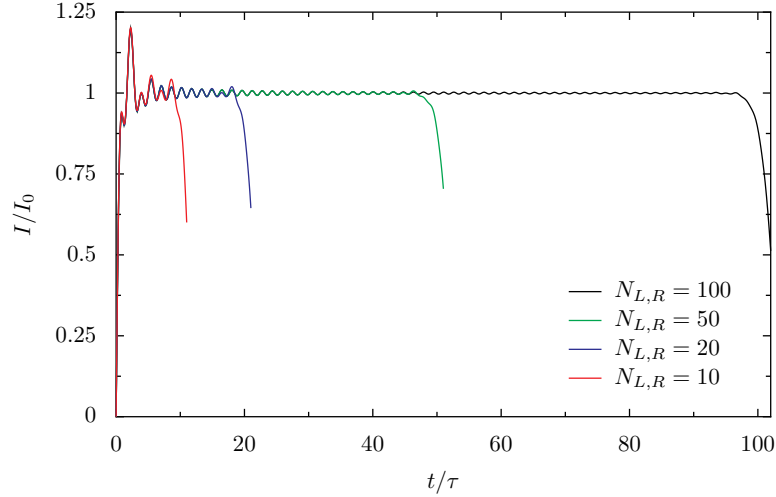


Abbildung 2.3: Stationäre Ströme eines ungestörten Systems mit $t' = t_0$, $eV = t_0$, $\varepsilon_S = 0$ und $\beta_{L,R} = 5/t_0$ für verschiedene Längen der Leads $N_{L,R}$.

Im Abschnitt 2.3.1 hatten wir für den großkanonischen Dichteoperator lediglich vorausgesetzt, dass die Zuleitungen hinreichend groß sein sollen, damit die Spannung und der Temperaturunterschied der Leads nicht vom chemischen Potential und Temperatur der Streuregion beeinflusst werden. Aber was ist nun „hinreichend groß“? In Grafik 2.3 sind die Ladungsströme für verschiedene Größen der Leads abgebildet. Wie man erkennen kann, ändern sich hauptsächlich die Längen der stationären Bereiche, da diese von $N_{L,R}$ abhängig sind. Sonst erreichen die Ströme den gleichen Plateauwert, wobei man mit längeren Leads auch genauere Werte für den stationären Strom bestimmen kann. Mit Zuleitungen der Länge $N_{L,R} = 10$ lässt sich nur ein grober Wert für das stationäre Plateau abschätzen. Das Verhalten der Ladungsströme nach der Zeit wurde unter anderem von Branschädel *et al.* [41] bereits untersucht.

In Grafik 2.3 wurden die gleichen Parameter wie für den Strom aus Abb. 2.2 benutzt, mit Ausnahme von einer kleineren inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 5/t_0$. Der Grund hierfür ist, dass die Länge der Leads nicht nur die Dauer der stationären Ströme beeinflusst, es treten zudem bei tiefen Temperaturen quantenmechanische Effekte⁹ auf, wenn die Leads zu kurz gewählt werden. Diese Effekte können in einem $I(V)$ -Diagramm dargestellt werden, indem man den stationären Strom numerisch für verschiedene Spannungen eV berechnet und dann wiederum

⁹ Weil die Fermi-Kante bei tiefen Temperaturen sehr scharf ist, kann diese von den diskreten Energieniveaus nicht mehr „aufgelöst“ werden, da diese bei kurzen Leads zu weit auseinanderliegen und es entstehen Stufen im $I(V)$ -Diagramm.

gegen die Spannung aufrägt. Wie man in Abb. 2.4 erkennen kann, bildet der Ladungsstrom nach der Spannung für kurze Leads ($N_{L,R} = 20$) und tiefe Temperaturen ($\beta_{L,R} = 150/t_0$) Stufen aus, die bei längeren Leads ($N_{L,R} = 200$) nicht vorkommen. Hier wurde die Spannung in einem Bereich $|eV| < 5t_0$ variiert. Die sonstigen Parameter wurden wie in Abb. 2.2 gewählt.

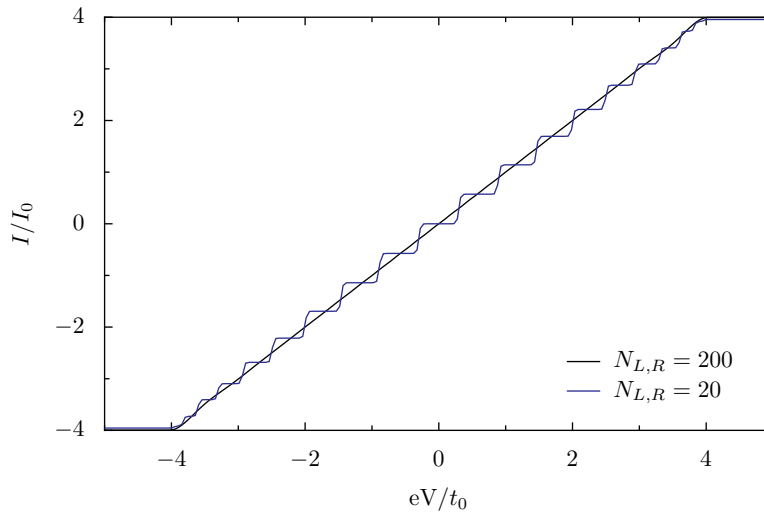


Abbildung 2.4: $I(V)$ -Diagramm bei tiefen Temperaturen $\beta_{L,R} = 150/t_0$ für verschiedene Längen der Leads. Die anderen Parameter sind mit $t' = t_0$ und $\varepsilon_S = 0$ gegeben.

Es muss also bei der Anzahl der Gitterplätze in den Leads darauf geachtet werden, wie genau der stationäre Strom bestimmt werden soll (umso mehr Gitterplätze, desto genauer die Werte). Zudem muss bei tiefen Temperaturen die Anzahl der Plätze erhöht werden, um quantenmechanische Effekte (Stufen im $I(V)$ -Diagramm) zu vermeiden, welche die Ergebnisse verfälschen können.

Alles, was bisher für den Ladungsstrom diskutiert wurde, gilt auch für den Energiestrom, den wir ausführlich bei den thermoelektrischen Effekten und der Wärmemaschine in den Kapiteln 4 und 5 diskutieren werden.

In Abb. 2.5 ist ein Beispiel für einen Ladungs- und Energiestrom für eine Streuregion mit zwei Gitterplätzen gegeben. Hier wurde das Potential $\varepsilon_S = 0.8t_0$ und die Hoppingparameter $t' = 0.4t_0$ und $t_S = t_0$ verwendet. Zudem wurde die Spannung $eV = t_0$ angelegt und es wurden verschiedene inverse Temperaturen für die Leads mit $\beta_L = 10/t_0$ und $\beta_R = 30/t_0$ gewählt. Man kann deutlich die stationäre Phase der Ströme erkennen, welche wir beispielsweise für die $I(V)$ -Diagramme verwenden. Hier muss allerdings beachtet werden, dass die Fluktuationen an den Rändern nicht eingerechnet werden, da diese sonst das Ergebnis verfälschen.

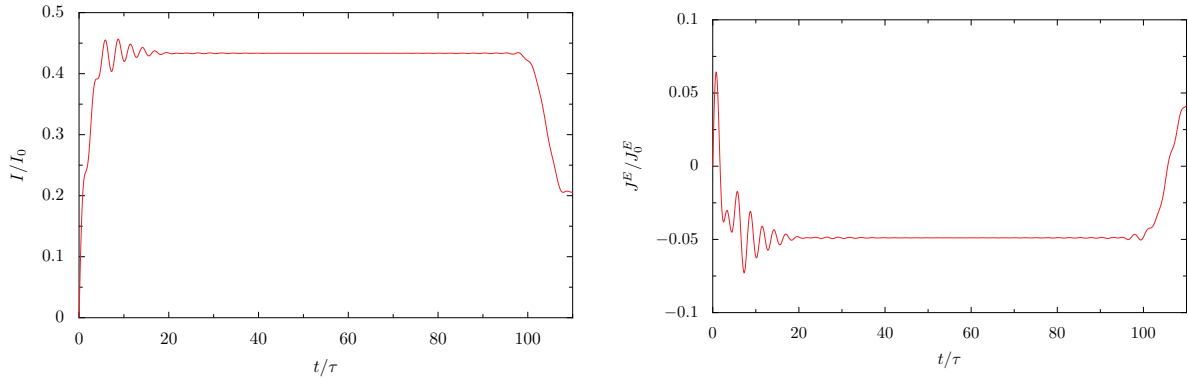


Abbildung 2.5: Beispiel eines Ladungs- und Energiestroms, als Funktion der Zeit mit zwei Gitterplätzen in der Streuregion. Als Parameter wurden die Hoppingparameter $t' = 0.4t_0$ und $t_S = t_0$, und die Gatespannung $\varepsilon_S = 0.8t_0$ verwendet. Zudem wurde eine Spannung $eV = t_0$ zwischen den Leads angelegt und die inversen Temperaturen $\beta_L = 10/t_0$ und $\beta_R = 30/t_0$ benutzt.

Um die Richtigkeit der in diesem Abschnitt berechneten Ströme überprüfen zu können, werden wir uns im nächsten Abschnitt mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus eine andere Methode ansehen, mit der die stationären Ströme direkt bestimmt werden können.

2.4 Landauer-Büttiker-Formalismus

Der Landauer-Büttiker-Formalismus ist ein alternativer Weg den stationären Ladungs- und Energiestrom durch die Streuregion eines Systems zu bestimmen, ohne explizit die Zeitentwicklung zu verwenden. Um den Formalismus besser verstehen zu können, werden wir im ersten Abschnitt eine phänomenologische Herleitung präsentieren und herausfinden, dass die Ströme im Landauer-Büttiker-Formalismus von den Energiebändern der Leads und der Transmission der Streuregion abhängen. In den letzten beiden Abschnitten werden wir den Einfluss der Leads und der Streuregion auf die Ströme diskutieren, was im Landauer-Büttiker-Formalismus viel transparenter erläutert werden kann, als bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators.

2.4.1 Phänomenologische Herleitung

Um eine phänomenologische Herleitung des Landauer-Büttiker-Formalismus durchzuführen zu können, betrachten wir zunächst die isolierten Leads bei einer inversen Temperatur $\beta_{L,R}$ und einem chemischen Potential $\mu_{L,R}$. Die energetische Wahrscheinlichkeitsverteilung der wechselwirkungsfreien Elektronen ist dann durch die Fermi-Verteilung

$$f_{L,R}(E_{k_{L,R}}) = \left[e^{\beta_{L,R}(E_{k_{L,R}} - \mu_{L,R})} + 1 \right]^{-1} \quad (2.49)$$

in den Zuleitungen definiert. Die Fermi-Verteilung ist bei einer Temperatur $T = 0$ eine Stufenfunktion, die an der Fermi-Kante ($E_{k_{L,R}} = \mu_{L,R}$) vom Wert 1 auf 0 springt. Bei steigenden Temperaturen „weicht“ die Kante immer mehr auf.

Betrachtet man das System aus Abb. 2.1, kann ein Elektron mit einer bestimmten Energie E_k nur von der Zuleitung L in die Zuleitung R tunneln, falls in L die Fermi-Verteilung $f_L(E_k) \neq 0$ und in R die Fermi-Verteilung $f_R(E_k) \neq 1$ ist. Dies bedeutet, dass in der Zuleitung L eine endliche Wahrscheinlichkeit existiert, dass sich ein Elektron dort aufhält und es eine endliche Wahrscheinlichkeit für einen freien Platz im Lead R gibt. Zudem muss für ein Elektron der Energie E_k die Transmissionswahrscheinlichkeit $\mathcal{T}(E_k) > 0$ sein, um durch die Streuregion tunneln zu können. Natürlich gilt für das Tunneln eines Elektrons von Lead R nach L das Gleiche.

Ausgedrückt in Formeln erhält man mit diesen Annahmen den Ladungsstrom

$$I = \frac{e}{N_L} \sum_{k_L > 0} v_{k_L} f_L(E_{k_L}) (1 - f_R(E_{k_L})) \mathcal{T}(E_{k_L}) + \frac{e}{N_R} \sum_{k_R < 0} v_{k_R} f_R(E_{k_R}) (1 - f_L(E_{k_R})) \mathcal{T}(E_{k_R}). \quad (2.50)$$

Die Gruppengeschwindigkeiten in den Leads haben durch die verschiedenen Vorzeichen des Summationsindex k auch verschiedene Vorzeichen. Es ist hier gewollt, dass nur Elektronen betrachtet werden, die sich entweder vom linken Lead oder vom rechten auf die Streuregion zubewegen. In dieser einfachen Herleitung nehmen wir an, dass die Parameter in den Zuleitungen gleich sind ($t_0 = t_{L,R}$ und $\varepsilon_0 = \varepsilon_{L,R}$), wobei die Gruppengeschwindigkeiten in den Leads dann den gleichen Betrag haben ($v_k = |v_{k_L}| = |v_{k_R}|$). Nimmt man zudem an, dass die Leads gleich lang sind mit $N_{\text{Lead}} = N_L = N_R$ und die Transmission $\mathcal{T}(E_k)$ von beiden Seiten gleich ist, kann man die Summen zusammenfassen und erhält

$$I = \frac{e}{N_{\text{Lead}}} \sum_{k > 0} v_k \mathcal{T}(E_k) (f_L(E_k) - f_R(E_k)). \quad (2.51)$$

Nun führen wir den sogenannten thermodynamischen Grenzfall durch, indem wir die Zuleitungen in eine Richtung als unendlich lang annehmen ($N_{\text{Lead}} \rightarrow \infty$) und Gl. (2.51) mit dem Faktor $dk N_{\text{Lead}} / 2\pi$ multiplizieren. Die Energieniveaus der Elektronen, die wir bis jetzt diskret behandelt hatten, sind damit kontinuierlich und wir integrieren bei der Landauer-Büttiker-Formel über alle Wellenzahlen k . Zudem ersetzen wir die Gruppengeschwindigkeit durch $v_k = dE_k / \hbar dk$ und erhalten [42, 43]

$$I = \frac{e}{h} \int dE \mathcal{T}(E) (f_L(E) - f_R(E)) \quad (2.52)$$

für den Ladungsstrom. In der kontinuierlichen Landauer-Büttiker-Formel in einer Dimension spielt die Zustandsdichte der Elektronen keine Rolle mehr, weswegen die Wellenzahl als Index der Energie weggelassen wird.

Analog zum Ladungsstrom kann der Energie-, aber auch der Wärmestrom durch eine Landauer-Büttiker-Formel dargestellt werden. Der Energiestrom ist dann gegeben durch [43]

$$J^E = \frac{1}{h} \int dE E \mathcal{T}(E) (f_L(E) - f_R(E)), \quad (2.53)$$

und der Wärmestrom kann wie folgt ausgedrückt werden [43]

$$J^W = \frac{1}{h} \int dE (E - \mu_S) \mathcal{T}(E) (f_L(E) - f_R(E)). \quad (2.54)$$

Beim Wärmestrom kann man immer die Aussage treffen, dass dieser von der heißen Zuleitung zur kalten fließt. Beim Energiestrom ist dies nicht zwangsläufig der Fall. Den Wärmestrom werden wir für die Berechnung des Wirkungsgrads einer Wärmemaschine in Kapitel 5 benötigen, weswegen wir diesen hier schon einmal vorstellen.

Da für den Ladungsstrom nur eine phänomenologische Herleitung benutzt wurde, sind einige Schritte vereinfacht worden, beispielsweise, dass die Gruppengeschwindigkeiten (also die Wellenzahlen $k_{L,R}$) in den Leads gleich sein müssen. Im Allgemeinen gilt der Landauer-Büttiker-Formalismus auch für Leads mit unterschiedlichen $k_{L,R}$, wie man der allgemeinen Herleitung des Formalismus im Buch von M. Di Ventra [44] entnehmen kann.

Integriert wird bei der Landauer-Büttiker-Formel im Allgemeinen über alle Energien $-\infty < E < \infty$. Dies kann aber wegen der Energiebänder der Leads durch endliche Grenzen vereinfacht werden, was wir im Abschnitt 2.4.3 diskutieren werden. Im nächsten Abschnitt betrachten wir die Transmissionen, welche für den Landauer-Büttiker-Formalismus benötigt werden, genauer.

2.4.2 Transmission einer eindimensionalen Streuregion

Der Landauer-Büttiker-Formalismus erlaubt uns nun, den Ladungs- und Energiestrom eines Systems zu berechnen, solange wir die Transmission durch eine Streuregion und die Energiebänder der Zuleitungen kennen. Wie man die Energiebänder einer eindimensionalen Zuleitung berechnet wissen wir bereits aus Gl. (2.13).

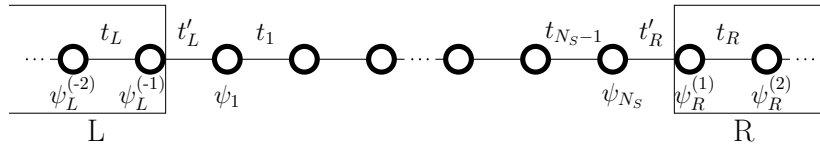


Abbildung 2.6: Ein eindimensionales System mit zwei Zuleitungen und deren zugehörigen Eigenzuständen $\psi_{L,R}^{(j)}$. Zudem die Streuregion mit den Zuständen ψ_j .

Nun werden wir die Transmission für ein System wie in Abb. 2.1 berechnen, indem wir die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_{\text{ges}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.55)$$

als Streuproblem lösen, wobei der Hamiltonoperator aus Gl. (2.9) verwendet wird. Um die Schrödinger-Gleichung lösen zu können, benötigen wir die Eigenzustände des Systems. Dazu teilen wir die Zuleitungen und die Streuregion in drei Bereiche auf und betrachten die folgenden Eigenzustände in der Ortsbasis, $\psi_{L,R}^{(j)} = \langle j|\psi_{L,R}\rangle$ in den Zuleitungen und $\psi_j = \langle j|\psi\rangle$ im zentralen Bereich (s. Abb. 2.6), genauer. Weil wir in den Zuleitungen jeweils die gleichen Hoppingparameter $t_{L,R}$ und Potentiale $\varepsilon_{L,R}$ verwenden, können wir die Eigenzustände in den Leads als ebene Wellen $\psi_{L,R}^{(j)} = A \exp(ik_{L,R}j)$ annehmen. Dies kann leicht nachgewiesen werden, indem wir in die diskrete Schrödinger-Gleichung den Exponentialansatz einsetzen

$$\begin{aligned} E\langle j|\psi_{L,R}\rangle &= \langle j|H_{L,R}|\psi_{L,R}\rangle \\ EAe^{ik_{L,R}j} &= -t_{L,R}Ae^{ik_{L,R}(j-1)} + \varepsilon_{L,R}Ae^{ik_{L,R}j} - t_{L,R}Ae^{ik_{L,R}(j+1)}, \quad (2.56) \\ E &= -2t_{L,R}\cos(k_{L,R}) + \varepsilon_{L,R} \end{aligned}$$

wobei $H_{L,R}$ die zugehörige Matrix zum Hamiltonoperator $\hat{H}_{L,R}$ aus Gl. (2.4) und (2.5) und A die Amplitude der ebenen Welle ist. Damit wissen wir, dass ein Ansatz mit ebenen Wellen zumindest den Hamiltonoperator in den Leads diagonalisiert.

Wir berechnen also die Transmission mit einer ebenen Welle, welche mit einer Amplitude A von der linken Zuleitung zur Streuregion einfällt und dort mit einer Amplitude B reflektiert oder mit C' transmittiert wird. Insgesamt sind die Eigenzustände der Zuleitungen

dann

$$\psi_{L,R}^{(j)} = \begin{cases} Ae^{ik_L j} + Be^{-ik_L j} & j \leq 0 \\ C'e^{ik_R(N_S+j)} & j > 0 \end{cases}, \quad (2.57)$$

wobei hier der Koordinatenursprung in Abb. 2.6 auf den letzten Gitterplatz des linken Leads gelegt wurde.

Weil wir die Eigenfunktionen der Leads nun kennen, erhalten wir mit der Schrödinger-Gleichung aus Gl. (2.55) folgende Gleichungen

$$\begin{aligned} -t_L [A \exp(-ik_L) + B \exp(ik_L)] - t'_L \psi_1 &= (E - \varepsilon_L)(A + B) \\ -t'_L(A + B) - t_1 \psi_2 &= (E - \varepsilon_1)\psi_1 \\ &\vdots \\ -t_{N_S-1} \psi_{N_S-1} - t'_R C' \exp[ik_R(N_S + 1)] &= (E - \varepsilon_{N_S})\psi_{N_S} \\ -t'_R \psi_{N_S} - t_R C' \exp[ik_R(N_S + 2)] &= (E - \varepsilon_R)C' \exp[ik_R(N_S + 1)] \end{aligned} \quad (2.58)$$

Um die nachfolgenden Rechnungen der Transmission zu vereinfachen, definieren wir die Amplitude C' mit

$$C = C' e^{ik_R(N_S+1)}. \quad (2.59)$$

Da wir mit C nur die Transmission mit $\mathcal{T}(E) \sim |C|^2$ bestimmen werden, fällt die Phase sowieso heraus. Die Eigenzustände sind dann mit

$$\psi_{L,R}^{(j)} = \begin{cases} Ae^{ik_L j} + Be^{-ik_L j} & j \leq 0 \\ Ce^{ik_R j} & j \geq 0 \end{cases}, \quad (2.60)$$

gegeben.

Setzen wir nun die einfallende Amplitude $A = 1$, haben wir $N_S + 2$ Gleichungen und gleich viele unbekannte Parameter. Deswegen können wir die Gleichungen aus (2.58) in ein lineares Gleichungssystem umschreiben und erhalten

$$\begin{pmatrix} -t_L e^{-ik_L} & t'_L & & & \\ t'_L & (E - \varepsilon_1) & t_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & t_{N_S-1} & (E - \varepsilon_{N_S}) & t'_R \\ & & & t'_R & -t_R e^{-ik_R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N_S} \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_L e^{ik_L} \\ -t'_L \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Mit dem Ausdruck für die Transmission aus Gl. (2.23), den wir mit Hilfe der Ladungsstromdichte gefunden hatten, können wir die Transmission eines konkreten Systems wie folgt

angeben:

$$\mathcal{T}(E) = \left| \frac{v_{k_R}}{v_{k_L}} \right| |C|^2. \quad (2.62)$$

Die Amplitude C müsste eigentlich noch durch die Amplitude A dividiert werden, die wir aber auf „1“ gesetzt haben.

Analog zur Transmission kann die Reflexion auch durch

$$\mathcal{R}(E) = |B|^2 \quad (2.63)$$

ausgedrückt werden. Der Term mit den Gruppengeschwindigkeiten fällt bei der Reflexion heraus, da sich die Wellenzahlen für die reflektierte Welle nie ändern. Weil in unserem abgeschlossenen System Teilchenerhaltung gilt, kann die Reflexion auch durch $\mathcal{R}(E) = 1 - \mathcal{T}(E)$ bestimmt werden.

Betrachtet man die Zuleitungen mit den gleichen Hoppingparametern $t_0 = t_{L,R}$ und keinem Potential $\varepsilon_{L,R} = 0$, ist die einfachste Variante des Systems aus 2.6 mit einem Gitterplatz in der Streuregion ($N_S=1$). Die Transmission kann analytisch bestimmt werden und hat die Form

$$\mathcal{T}(E) = \frac{t_L'^2 t_R'^2 \left(4 - \frac{E^2}{t_0^2}\right)}{t_0^2 (E - \varepsilon_S)^2 - E(E - \varepsilon_S)(t_L'^2 + t_R'^2) + (t_L'^2 + t_R'^2)^2}, \quad (2.64)$$

wobei hier ε_S das Potential am zentralen Gitterplatz darstellt. Aus dem analytischen Ausdruck für die Transmission eines Gitterplatzes kann man bereits einige interessante Eigenschaften herauslesen. Setzt man beispielsweise die Hoppingparameter auf den gleichen Wert $t_{L,R}' = t_0$ und verwendet kein Potential ($\varepsilon_S = 0$), so ist die Transmission $\mathcal{T}(E) = 1$ für die Energien im gesamten Bandbereich ($-2t_0 < E < 2t_0$) der Leads.

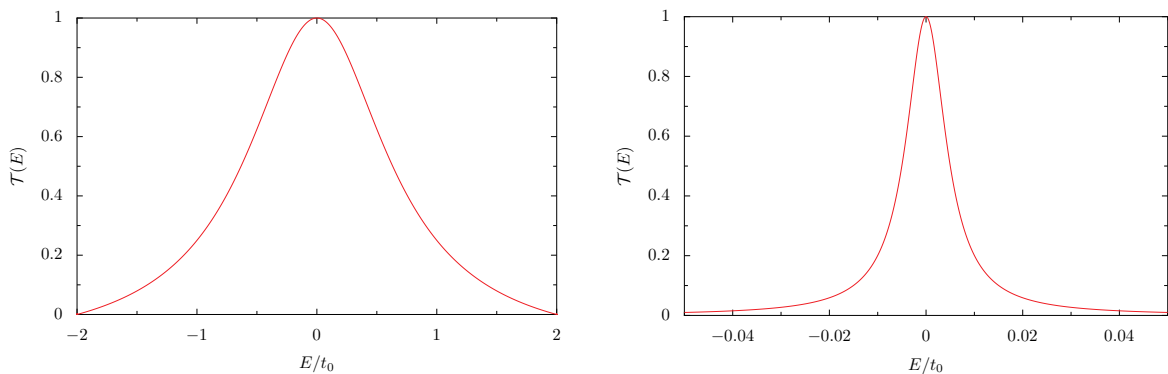


Abbildung 2.7: Transmissionen einer Streuregion mit einem Gitterplatz ohne Gatepotential $\varepsilon_S = 0$. Verwendet wurden im linken Bild die Hoppingparameter $t'_{L,R} = 0.5t_0$ und im rechten Bild $t'_{L,R} = 0.05t_0$. Man beachte die verschiedenen Energiebereiche der Transmissionen.

In Abb. 2.7 ist die Transmission für verschiedene Hoppingparameter $t'_{L,R}$ abgebildet. Im linken

Bild ist der Hoppingparameter mit $t'_{L,R} = 0.5t_0$ verglichen mit der Größe des Energiebands der Leads groß gewählt. Die Transmission sieht wie eine Lorentz-Verteilung aus, die zum Rand hin aber schnell abfällt. Vergleicht man die Transmission mit einem kleineren Hoppingparameter $t'_{L,R} = 0.05t_0$ im rechten Bild, kann man definitiv von einer Lorentz-Verteilung sprechen. In diesem Fall sind wir im sogenannten Wide-Band Limes, bei dem $t_0 \gg t'_{L,R}$ gilt. Hier ist der Transport auf den linearen Bereich des Energiebands der Zuleitungen beschränkt und wir können für die Wellenzahlen $k \approx \pi/2$ annehmen. Damit fallen alle Terme in der Transmission aus Gl. (2.64) heraus, bei denen die Energie ohne das Potential vorkommt und wir erhalten

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + \frac{(E - \varepsilon_S)^2}{\gamma^2}}, \quad (2.65)$$

wobei wir hier $t' = t'_{L,R}$ gewählt und die Hoppingparameter mit $\gamma = 2t'^2/t_0$ zusammengefasst haben. Die Transmission für einen Gitterplatz ist also im Wide-Band Limes durch die Lorentz-Funktion gegeben, bei der das Maximum durch das Potential ε_S verschoben werden kann.

Analytische Ausdrücke für die Transmission werden im Allgemeinen für eine höhere Anzahl von Gitterplätzen in der Streuregion schnell sehr unübersichtlich und werden deshalb nur numerisch berechnet. Es gibt allerdings einige Ausnahmen, die wir im Kapitel 5 diskutieren werden.

Wir haben nun in diesem Abschnitt eine allgemeine Berechnungsmethode für die Transmission durch eine Streuregion von Systemen wie in Abb. 2.1 gefunden und somit alle Fälle abgedeckt, wie der zentrale Bereich die Ströme beeinflussen kann. Im nächsten Abschnitt diskutieren wir mit Hilfe der thermischen Besetzungszahlen eines Systems, welchen Einfluss die Leads auf den Stromfluss haben können.

2.4.3 Einfluss der Leads auf die Ströme

Die Zuleitungen sind in unseren Systemen Wärme- und Teilchenbäder, welche, verglichen mit der Streuregion, sehr groß sind. Um zu verstehen, wie sich Temperatur(-differenz) und Spannung der Leads auf den Ladungsstrom auswirken, benutzen wir die thermischen Besetzungszahlen eines Systems wie in Abb. 2.8.

Bei den Diagrammen sind die energetischen Besetzungen der Elektronen in den Leads durch verschiedene Grautöne gekennzeichnet (dunkelgrau für voll besetzte, weiß für unbesetzte Energieniveaus), welche durch die Fermi-Funktionen aus Gl. (2.49) gegeben sind. Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst Leads mit gleichen Hoppingparametern $t_0 = t_{L,R}$ und keinem Potential $\varepsilon_{L,R} = 0$. Zudem soll die Fermi-Kante bei $\mu_S = 0$ liegen. Als Transmission betrachten wir der Einfachheit halber einen Gitterplatz in der Streuregion, welcher sehr schwach

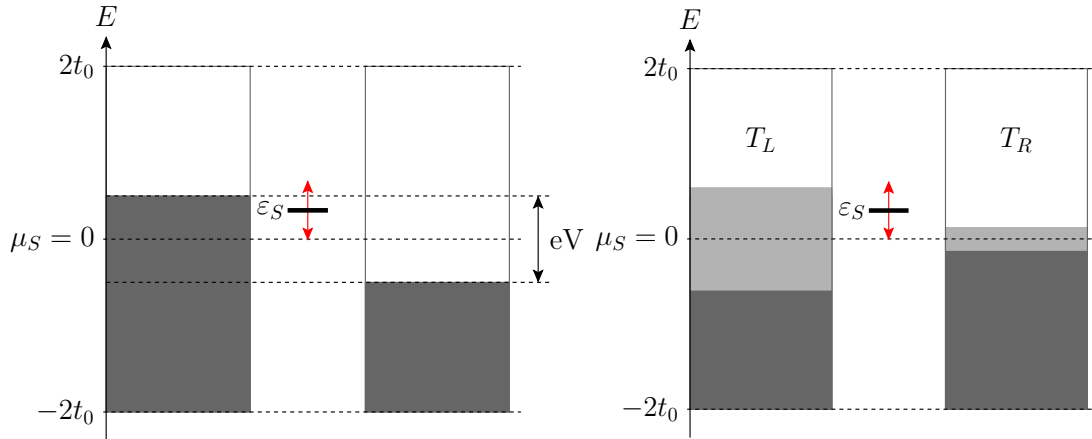


Abbildung 2.8: Thermische Besetzungszahlen eines Systems mit gleichen Energiebändern in den Zuleitungen. Bei der linken Abbildung wurde eine Spannung zwischen den Leads angelegt und bei der rechten eine Temperaturdifferenz. Durch die Streuregion kann über ein Energieniveau getunnelt werden, welches durch eine Gatespannung ϵ_S verschoben werden kann.

an die Zuleitungen gekoppelt ist ($t' \rightarrow 0$), sodass $\mathcal{T}(E)$ sehr scharf um $E = \epsilon_S$ zentriert ist (siehe Abb. 2.7).

In der linken Abbildung betrachten wir eine Spannung eV zwischen den Leads. Die Temperatur des Systems liegt bei $T = 0K$, daher sind die Fermi-Funktionen Stufenfunktionen mit einer scharfen Kante. Mit dieser Konfiguration gibt es nur besetzte Zustände bis zur Energie der chemischen Potentiale $\mu_{L,R}$ und unbesetzte Zustände für Energien darüber. Ein Ladungsstrom kann zustande kommen, falls $\mu_R \leq \epsilon_S \leq \mu_L$, wobei dieser dann von rechts nach links fließt.¹⁰ Das ist auch der einzige Fall, denn falls wir $\epsilon_S < \mu_R$ wählen, kann ein Elektron vom linken Lead nicht in das rechte tunneln, da alle Energieniveaus besetzt sind, und wählen wir $\epsilon_S > \mu_L$ gibt es keine besetzten Zustände mehr.

Im rechten Bild aus Abb. 2.8 betrachten wir das System ohne Spannung, dafür aber mit einer Temperaturdifferenz zwischen den Zuleitungen, wobei hier $T_L > T_R$ gilt. Die „Aufweichung“ der Fermi-Kante bei endlichen Temperaturen wird hier durch den hellgrauen Bereich dargestellt. Weil bei der heißeren linken Zuleitung die Fermi-Kante stärker verbreitert ist als bei der rechten, ist für ein Gatepotential $\epsilon_S > 0$ die Zustandsdichte im linken Lead größer, weswegen der Ladungsstrom von rechts nach links fließt. Wählt man $\epsilon_S < 0$, so ist dies genau umgekehrt und der Ladungsstrom fließt von links nach rechts. Auch wenn in der Abbildung der hellgraue Bereich scharfe Kanten hat, ist dies für Besetzungen aus den Fermi-Funktionen nicht gegeben. Diese gehen bei endlichen Temperaturen sehr schnell gegen die Werte „1“ und „0“, erreichen diese aber nur im Unendlichen. Deshalb erhält man für eine Differenz von

¹⁰ Das Elektron bewegt sich wegen der Dichteunterschiede der Leads eigentlich von der linken Zuleitung in die Rechte, was dann als Teilchenstrom bezeichnet wird. Wegen der negativen Elementarladung e fließt der Ladungsstrom in die umgekehrte Richtung.

endlichen Temperaturen in den Zuleitungen im ganzen Energiebereich $-2t_0 < E < 2t_0$ Werte für den Ladungsstrom $I \neq 0$.

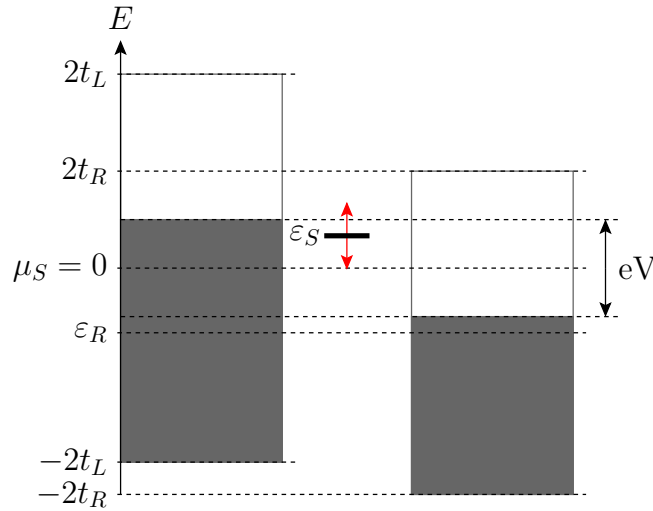


Abbildung 2.9: Thermische Besetzungszahlen eines Systems mit verschiedenen Energiebändern in den Zuleitungen bei einer Temperatur $T = 0K$ und einer Spannung eV .

Wie wirken sich nun verschiedene Energiebänder in den Zuleitungen auf die Ströme aus? In Abb. 2.9 betrachten wir das linke Lead mit einem Hoppingparameter t_L und keinem Potential ε_L . Die rechte Zuleitung mit dem Hoppingparameter t_R ist zusätzlich durch eine Gatespannung ε_R verschoben. Bei dieser Konfiguration wurde wieder zwischen den Zuleitungen eine Spannung bei einer Temperatur von $T = 0$ angelegt. Weil $t_L > t_R$ gilt, ist auch das linke Energieband breiter als das rechte. Ein Ladungsstrom kann nur in dem Energiebereich auftreten, bei dem die Energiebänder beider Zuleitungen sich überlappen. In diesem Bereich gelten wieder alle Regeln, welche wir bereits bei der linken Abbildung (2.8) besprochen hatten. Berechnet man die Ströme mit der Landauer-Büttiker-Formel, muss also bei verschiedenen Energiebändern darauf geachtet werden, die Integrationsgrenzen nicht außerhalb des Überlapps der Energiebänder zu definieren.

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels vergleichen wir die numerischen Ergebnisse der Ladungs- und Energieströme aus dem Landauer-Büttiker-Formalismus mit den stationären Strömen der Zeitenwicklung des Dichteoperators.

2.5 Landauer-Büttiker-Formalismus vs. Zeitentwicklung des Dichteoperators

In diesem Kapitel haben wir mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus und der Zeitentwicklung des großkanonischen Dichteoperators zwei Methoden diskutiert, mit denen wir den thermoelektrischen Transport eines Systems wie in Abb. 2.6 berechnen können. Dazu haben wir für beide Methoden Ausdrücke für den Ladungs- und Energiestrom¹¹ präsentiert, welche wir nun vergleichen werden.

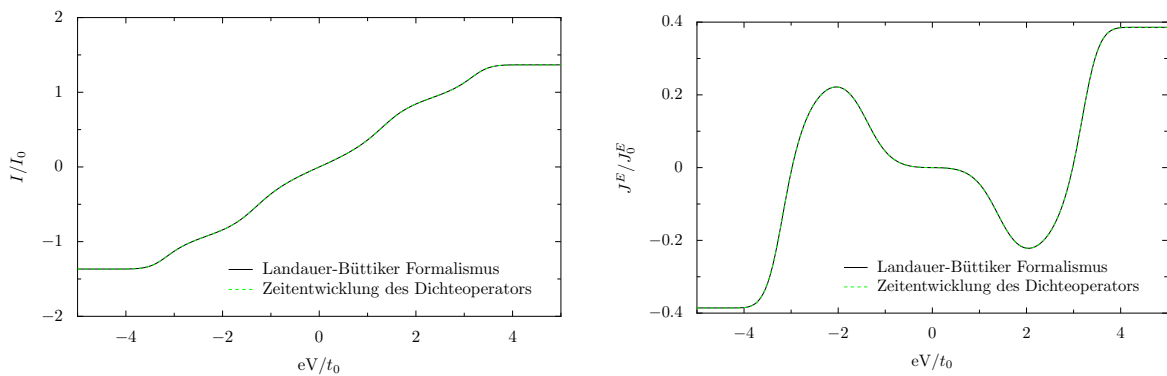


Abbildung 2.10: Vergleich des Landauer-Büttiker-Formalismus mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators in einem $I(V)$ -Diagramm für einen Ladungs- und Energiestrom. Die Streuregion besteht aus zwei Gitterplätzen mit dem Potential $\varepsilon_S = 0.4t_0$ und dem Hoppingparameter $t_S = t_0$. Zudem wurden $t' = 0.5t_0$ und die inversen Temperaturen $\beta_{L,R} = 30/t_0$ benutzt.

In Abb. 2.10 vergleichen wir den Landauer-Büttiker-Formalismus mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators mit Hilfe des $I(V)$ -Diagramms eines Ladungs- und Energiestroms. Hierfür betrachten wir eine Streuregion mit zwei Gitterplätzen, dem Potential $\varepsilon_S = 0.4t_0$ und dem Hoppingparameter $t_S = t_0$. Die übrigen Parameter die verwendet wurden, sind $t' = 0.5t_0$, $\varepsilon_0 = 0$ und die inverse Temperatur $\beta_{L,R} = 30/t_0$.

Man kann erkennen, dass die Ergebnisse beider Methoden sehr gut übereinstimmen. Die relative Abweichung der Ströme beläuft sich auf maximal $\sim 10^{-3}$, wobei der größte Fehler bei der Berechnung des stationären Stroms aus der Zeitentwicklung des Dichteoperators auftritt. Um den Fehler zu minimieren, müssten die Leads verlängert werden, damit die Fluktuationen im stationären Bereich noch kleiner werden und ein besserer Mittelwert erzeugt werden kann. Da aber die Ergebnisse in den Graphen nicht sichtbar voneinander abweichen, genügt es für die Zeitentwicklung Zuleitungsgrößen von ~ 100 Plätzen zu verwenden.

¹¹ Bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators verwenden wir Gl. (2.22) zur Berechnung des Ladungsstroms und Gl. (2.31) zur Berechnung des Energiestroms. Zudem kann der Ladungs- und Energiestrom durch eine Streuregion mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus (s. Gl (2.52) und (2.53)) berechnet werden.

Sowohl beim Ladungs- als auch beim Energiestrom fällt auf, dass diese ab einer Spannung von ca. $eV \sim |4t_0|$ konstant bleiben. Dies liegt daran, dass die Energiebänder der Leads die Größe $4t_0$ besitzen, weswegen wir in dem Bereich sehr große Spannungen betrachten. Man kann hier also davon ausgehen, dass eine Zuleitung voll besetzt und die andere komplett leer ist und sich deshalb bei höherer Spannung bei den Strömen nichts mehr ändert.

In diesem Kapitel wurden nun die Grundlagen vorgestellt, wie Ladungs- und Energieströme durch einfache Streuregionen berechnet werden können. Dazu verwendeten wir einerseits die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Dichteoperators, andererseits den Landauer-Büttiker-Formalismus. Im nächsten Kapitel werden wir uns mit der Wechselwirkung der Elektronen in solch einem System auseinandersetzen. Dabei werden wir zunächst die Hartree-Fock-Näherung verwenden. Diese Ergebnisse werden wir dann mit exakten Werten, mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation und Ergebnissen aus der Literatur vergleichen.

3 Wechselwirkung zwischen Elektronen im Tight-Binding-Modell

In diesem Kapitel werden wir uns mit der Wechselwirkung der Elektronen im eindimensionalen Tight-Binding-Modell aus Kapitel 2 befassen. Weil die exakte Lösung im Allgemeinen selbst bei kleinen Systemen nur mit sehr großem numerischen Aufwand bestimmt werden kann oder dies mit heutigen Methoden und Computern gar nicht möglich ist, beschränkt man sich bei der Behandlung der Wechselwirkung meist auf Näherungen. Wir werden dazu die Hartree-Fock-Näherung benutzen, welche eine Molekularfeldtheorie darstellt. Hier wird die Wechselwirkung der Elektronen durch ein zusätzliches Potential der Gitterplätze (Hartree-Anteil) und modifizierte Hoppingparameter (Fock-Anteil) angenähert. Um bestimmen zu können, wie gut die Näherung ist, verwenden wir die exakte Berechnung der zeitabhängigen Ströme durch die wechselwirkende Region mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation. Zudem werden wir die Hartree-Fock-Näherung mit exakten Ergebnissen aus der Literatur, beispielsweise für das „*interacting resonant level model*“ (IRLM) in Abschnitt 3.4, vergleichen¹.

3.1 Der Hamiltonoperator mit Wechselwirkung und die Hartree-Fock-Näherung

Im Gegensatz zum Hamiltonoperator im Kapitel 2 werden noch Terme mit der Wechselwirkung der Elektronen hinzugefügt, was wir in diesem Abschnitt diskutieren werden. Weil der Hamiltonoperator für wechselwirkende Systeme mehr Terme enthält, muss zudem überprüft werden, ob die bisher verwendeten Ausdrücke für den Ladungs- und Energiestrom in Systemen mit Wechselwirkung noch gültig sind.

Der Einfachheit halber bleiben die Zuleitungen unseres Systems weiterhin wechselwirkungsfrei. Wir beschränken also die Wechselwirkung der Elektronen lediglich auf die Streuregion. Wie in Abb. 3.1 zu erkennen ist, betrachten wir verschiedene Arten der Wechselwirkung zwischen Elektronen in der Streuregion. Zum einen die Wechselwirkung von Elektronen

1 In diesem Kapitel werden hauptsächlich die Ergebnisse der Publikation [45] vorgestellt.

zwischen benachbarten Plätzen in der Streuregion U_S , zum anderen zwischen Streuregion und Zuleitungen U' .

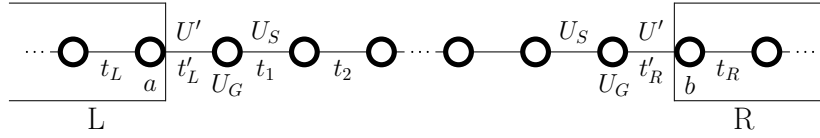


Abbildung 3.1: Abbildung zweier Zuleitungen, verbunden mit einer Streuregion mit N_S Gitterplätzen. In der Streuregion wechselwirken Elektronen zwischen zwei Gitterplätzen mit U_S oder Elektronen mit verschiedenem Spin wechselwirken mit U_G auf einem Gitterplatz. U' ist die Wechselwirkung der Elektronen zwischen Lead und Streuregion.

Der besseren Übersicht halber betrachten wir zunächst weiterhin spinlose Elektronen, so dass die Wechselwirkung von Elektronen mit verschiedenen Spins auf einem Gitterplatz U_G nicht beachtet wird. Die Wechselwirkung U_G werden wir in Abschnitt 3.5 diskutieren, wobei diese aber nahezu analog zur Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen auf benachbarten Gitterplätzen behandelt werden kann, was wir nun im Folgenden vorstellen werden.

Der Hamiltonoperator [46] für das System aus Abb. 3.1 mit spinlosen Elektronen ist dann in der Streuregion mit

$$\hat{H}_{S,U} = \sum_{j=a+1}^{b-2} \left[-t_j (\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.}) + U_S \left(\hat{n}_{j+1} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_j - \frac{1}{2} \right) \right] + \sum_{j=a+1}^{b-1} \varepsilon_j \hat{n}_j, \quad (3.1)$$

und für die Verbindungen zwischen den Zuleitungen und der Streuregion mit

$$\hat{H}_{LS,U} = -t'_L (\hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a + \text{h.c.}) + U' \left(\hat{n}_a - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{a+1} - \frac{1}{2} \right) \quad (3.2)$$

$$\hat{H}_{SR,U} = -t'_R (\hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} + \text{h.c.}) + U' \left(\hat{n}_{b-1} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_b - \frac{1}{2} \right) \quad (3.3)$$

gegeben. Der Wechselwirkungsterm beinhaltet hier die Teilchen-Loch-Symmetrie, was heißt, dass die mittlere Besetzungszahl ohne zusätzliches chemisches Potential μ_S bei $\langle \hat{n}_\alpha \rangle = 1/2$ liegt.

Der Hamiltonoperator des gesamten Systems ist dann

$$\hat{H}_{\text{ges},U} = \hat{H}_L + \hat{H}_{LS,U} + \hat{H}_{S,U} + \hat{H}_{SR,U} + \hat{H}_R, \quad (3.4)$$

wobei \hat{H}_L und \hat{H}_R die wechselwirkungsfreien Hamiltonoperatoren aus den Gl. (2.4) und (2.5) sind.

Bisher hatten wir bei den verwendeten Methoden bilineare Operatoren der Form $\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta$ behandelt. Im Wechselwirkungsterm tauchen nun aber Operatoren der Form $\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta$ auf. Mit diesen Operatoren im Hamiltonoperator lässt sich die Transmission nicht wie in Abschnitt 2.4.2 über das Streuproblem lösen, da in der Streuregion alle Teilchen miteinander wechselwirken können und wir lediglich die Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichung gelöst hatten. Des Weiteren können wir auch bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators die Rechnung nicht auf Matrizen der Größe $N_{\text{ges}} \times N_{\text{ges}}$ reduzieren (s. Abschnitt 2.3), da dies nur mit bilinearen Operatoren gültig ist.

Um die Wechselwirkung mit diesen Methoden dennoch behandeln zu können, verwenden wir die Hartree-Fock-Näherung. Beim Hartree-Term schreiben wir die Besetzungszahloperatoren in der Form $\hat{n}_\alpha = \langle \hat{n}_\alpha \rangle + (\hat{n}_\alpha - \langle \hat{n}_\alpha \rangle)$ und erhalten damit für den Wechselwirkungsterm

$$\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta = \langle \hat{n}_\alpha \rangle \hat{n}_\beta + \langle \hat{n}_\beta \rangle \hat{n}_\alpha - \langle \hat{n}_\alpha \rangle \langle \hat{n}_\beta \rangle + (\hat{n}_\alpha - \langle \hat{n}_\alpha \rangle)(\hat{n}_\beta - \langle \hat{n}_\beta \rangle). \quad (3.5)$$

Der letzte Term ist quadratisch in der Abweichung vom Mittelwert $\delta \hat{n}_\alpha = \hat{n}_\alpha - \langle \hat{n}_\alpha \rangle$ und wird bei Hartree-Fock vernachlässigt. Insgesamt erhält man dann für die Hartree-Fock-Näherung

$$\begin{aligned} \hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta \rightarrow & \langle \hat{n}_\alpha \rangle \hat{n}_\beta + \langle \hat{n}_\beta \rangle \hat{n}_\alpha - \langle \hat{n}_\alpha \rangle \langle \hat{n}_\beta \rangle - \langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\alpha \\ & - \langle \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\alpha \rangle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta + \langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle \langle \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Bei der Hartree-Fock-Näherung, welche eine Molekularfeldtheorie darstellt, werden also durch die Wechselwirkung der Elektronen sowohl die Potentiale (Hartree-Term), als auch die Hoppingparameter (Fock-Term in der zweiten Zeile von Gl. (3.6)) modifiziert. Der wechselwirkende Hamiltonoperator in der Hartree-Fock-Näherung ist für eine allgemeine lineare Kette mit der Wechselwirkung U_j zwischen den Gitterplätzen j und $j+1$ durch

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{j=1}^{N_{\text{ges}}-1} U_j \left[\left(\langle \hat{n}_j \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{j+1} + \left(\langle \hat{n}_{j+1} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_j \right. \\ \left. - \langle \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j \rangle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} - \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} \rangle \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

gegeben. Die Terme, bei denen zwei Erwartungswerte multipliziert werden, wurden hier weggelassen, da wir nur den thermoelektrischen Transport eines Systems beschreiben wollen und bei der Berechnung der Stromdichten diese Terme herausfallen, was wir in Abschnitt 3.2.1 behandeln werden.

Der gesamte Hamiltonoperator in der Hartree-Fock-Näherung für das System aus Abbildung 3.1 ist dann mit

$$\hat{H}_{\text{ges, HF}} = \hat{H}_L + \hat{H}_{LS, \text{HF}} + \hat{H}_{S, \text{HF}} + \hat{H}_{SR, \text{HF}} + \hat{H}_R \quad (3.8)$$

gegeben, wobei die Streuregion nun die Form

$$\begin{aligned} \hat{H}_{S,\text{HF}} = \sum_{j=a+1}^{b-2} \left[- (t_j + U_S \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} \rangle) \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j - (t_j + U_S \langle \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j \rangle) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} \right. \\ \left. + U_S \left(\langle \hat{n}_l \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{l+1} + U_S \left(\langle \hat{n}_{l+1} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_l \right] + \sum_{j=a+1}^{b-1} \varepsilon_j \hat{n}_j \end{aligned} \quad (3.9)$$

hat und für die Verbindungen zwischen Zuleitungen und Streuregion

$$\begin{aligned} \hat{H}_{LS,\text{HF}} = - (t'_L + U' \langle \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_{a+1} \rangle) \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a - (t'_L + U' \langle \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a \rangle) \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_{a+1} \\ + U' \left(\langle \hat{n}_a \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{a+1} + U' \left(\langle \hat{n}_{a+1} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_a \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SR,\text{HF}} = - (t'_R + U' \langle \hat{c}_{b-1}^\dagger \hat{c}_b \rangle) \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} - (t'_R + U' \langle \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} \rangle) \hat{c}_{b-1}^\dagger \hat{c}_b \\ + U' \left(\langle \hat{n}_{b-1} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_b + U' \left(\langle \hat{n}_b \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{b-1} \end{aligned} \quad (3.11)$$

gilt. Da die Hamiltonoperatoren mit Wechselwirkung mehr Terme beinhalten, kann man davon ausgehen, dass die Ausdrücke für den Ladungs- und Energiestrom aus Abschnitt 2.2 ihre Gültigkeit für wechselwirkende Systeme verlieren. Im nächsten Abschnitt werden wir daher die Ströme genauer betrachten und damit den thermoelektrischen Transport aus der Zeitentwicklung des wechselwirkenden Dichteoperators bestimmen. Des Weiteren werden wir die Ladungsströme durch das Zweiplatzmodell mit der Hubbard-Stratonovich-Transformation exakt berechnen und mit den Ladungsströmen aus der Hartree-Fock-Näherung vergleichen.

3.2 Zeitentwicklung der Dichtematrix mit Wechselwirkung

In diesem Abschnitt betrachten wir die Zeitentwicklung des Dichteoperators mit Wechselwirkung. Dazu benutzen wir zunächst die Hartree-Fock-Näherung, da hier die Wechselwirkungsterme auf bilineare Terme (Ein-Teilchen-Zustände) wie im Abschnitt 2.3.2 beschränkt werden. Da aber beim wechselwirkenden Hamiltonoperator Terme hinzukommen, muss überprüft werden, ob die Ausdrücke für die Ströme aus Abschnitt 2.2 noch gültig sind. Anschließend vergleichen wir die Ergebnisse der Hartree-Fock-Näherung mit den exakten Resultaten, welche unter Verwendung der Hubbard-Stratonovich-Transformation berechnet werden, wobei wir uns auf zwei wechselwirkende Gitterplätze in der Streuregion (Zweiplatzmodell) beschränken.

3.2.1 Hartree-Fock-Näherung und der thermoelektrische Transport

Wie wir bereits im letzten Abschnitt erwähnt hatten, bietet sich die Hartree-Fock-Näherung für die Behandlung der Wechselwirkung der Elektronen in der Streuregion an, da die Terme der Form $\hat{n}_l \hat{n}_{l+1}$ in bilineare Terme entkoppelt werden und wir die Ladungs- und Energieströme mit den Methoden aus dem Kapitel 2 bestimmen können. Da wir die Erwartungswerte $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ aus der Hartree-Fock-Näherung nicht direkt berechnen können, werden wir als „Startwert“ die Erwartungswerte des wechselwirkungsfreien Systems verwenden und dann selbstkonsistent die Werte für das System mit Wechselwirkung bestimmen. Dazu teilen wir die Zeitentwicklung des Dichteoperators in M Zeitschritte Δt mit $t = M\Delta t$ auf und erhalten

$$\hat{\rho}_{\text{HF}}(t) = e^{-i\hat{H}_{\text{ges,HF}}^{(M)}\Delta t} \dots e^{-i\hat{H}_{\text{ges,HF}}^{(1)}\Delta t} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}_{\text{ges,HF}}^{(1)}\Delta t} \dots e^{i\hat{H}_{\text{ges,HF}}^{(M)}\Delta t}, \quad (3.12)$$

wobei $\hat{\rho}(0)$ der wechselwirkungsfreie Dichteoperator aus Gl. (2.33) zur Zeit $t = 0$ ist.

Damit wir den Ladungs- und Energiestrom für wechselwirkende Systeme bestimmen können, benutzen wir die Kontinuitätsgleichungen aus Abschnitt 2.2 und werten diese wieder mit dem Ehrenfest-Theorem aus. Es treten nun im Allgemeinen Terme der Form $[\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta, \hat{n}_\gamma \hat{n}_\delta]_-$ und später bei der Berechnung der Energiestromdichte $[\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta, \hat{n}_\gamma \hat{n}_\delta]_-$ im Kommutator auf, die mit der allgemeinen Kommutatorrelation

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]_- = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]_- + [\hat{A}, \hat{B}]_- \hat{C} \quad (3.13)$$

umgeformt werden können. So erhalten wir mit Gl. (2.18)

$$[\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta, \hat{n}_\gamma \hat{n}_\delta]_- = \delta_{\beta\gamma} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \hat{n}_\delta - \delta_{\alpha\gamma} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \hat{n}_\delta + \delta_{\beta\delta} \hat{n}_\gamma \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta - \delta_{\alpha\delta} \hat{n}_\gamma \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta. \quad (3.14)$$

Mit Hilfe von Gl. (3.13) und der Tatsache, dass zwei Besetzungszahloperatoren vertauschen, fallen Terme der Form $[\hat{n}_\alpha, \hat{n}_\beta \hat{n}_\gamma]_- = 0$ weg.

Die Ladungsstromdichte - genauer gesagt, deren Erwartungswert - lässt sich am Platz l nun wie in Abschnitt 2.2.1 mit

$$\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{n}_l, \hat{H}_{\text{ges,U}}]_- \rangle = j_l^C - j_{l-1}^C \quad (3.15)$$

berechnen. Da die Besetzungszahloperatoren aber miteinander vertauschen, erhalten wir für die Ladungsstromdichte mit Wechselwirkung zwischen Platz l und $l+1$ die gleichen Ausdrücke wie im wechselwirkungsfreien Fall aus Gl. (2.19)

$$j_l^C = \frac{it_l e}{\hbar} (\langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle - \text{h.c.}). \quad (3.16)$$

Diskussionsbedarf besteht nun, ob wir das gleiche Ergebnis für die Ladungsstromdichte erhalten, wenn wir zuerst die Hartree-Fock-Näherung für den Hamiltonoperator durchführen und

anschließend die Stromdichte berechnen. Hier erhalten wir die Terme

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{n}_l, \hat{H}_{\text{ges, HF}}]_- \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{n}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_- \rangle + U_l (\langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} \rangle - \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} \rangle \langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle) \\ &\quad + U_{l-1} (\langle \hat{c}_{l-1}^\dagger \hat{c}_l \rangle \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l-1} \rangle - \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l-1} \rangle \langle \hat{c}_{l-1}^\dagger \hat{c}_l \rangle) \end{aligned} \quad (3.17)$$

wobei der erste Term die wechselwirkungsfreie Lösung darstellt. Wie man erkennen kann, fallen auch hier die wechselwirkenden Terme weg. Die Ausdrücke der Ladungsströme des Systems aus Abb. 3.1 sind für wechselwirkende Systeme also die gleichen wie im wechselwirkungsfreien Fall. Die Erwartungswerte der Form $\langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle$, die bei den Ausdrücken der Ladungsströme auftreten unterscheiden sich natürlich, abhängig von welchem System wir ausgehen. In dieser Arbeit betrachten wir wechselwirkungsfreie Systeme, wechselwirkende Systeme und Systeme bei denen die Wechselwirkung mit der Hartree-Fock-Näherung behandelt werden².

Nun berechnen wir den Energiestrom für ein wechselwirkendes System. Dazu schreiben wir den Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{ges}, U}$ des Gesamtsystems als Summe von lokalen Operatoren

$$\hat{H}_{\text{ges}, U} = \sum_l \hat{h}_{l, U} \quad (3.18)$$

und definieren

$$\hat{h}_{l, U} = \hat{h}_l + \frac{U_l}{2} \left(\hat{n}_{l+1} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_l - \frac{1}{2} \right) + \frac{U_{l-1}}{2} \left(\hat{n}_l - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{l-1} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.19)$$

wobei \hat{h}_l der wechselwirkungsfreie Operator aus Gl. (2.25) ist. Die Energieänderung eines Gitterplatzes l lässt sich wieder über den Kommutator von $\hat{h}_{l, U}$ und $\hat{H}_{\text{ges}, U}$ mit Gl. (3.14) berechnen und man erhält

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{h}_{l, U}, \hat{H}_{\text{ges}, U}]_- \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{h}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_- \rangle + \frac{iU_l t_{l+1}}{2\hbar} \left[\left\langle \left(\hat{n}_l - \frac{1}{2} \right) \hat{c}_{l+2}^\dagger \hat{c}_{l+1} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \\ &\quad + \frac{iU_{l+1} t_l}{2\hbar} \left[\left\langle \left(\hat{n}_{l+2} - \frac{1}{2} \right) \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \right\rangle - \text{h.c.} \right] \\ &\quad - \frac{iU_{l-2} t_{l-1}}{2\hbar} \left[\left\langle \left(\hat{n}_{l-2} - \frac{1}{2} \right) \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l-1} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \\ &\quad - \frac{iU_{l-1} t_{l-2}}{2\hbar} \left[\left\langle \left(\hat{n}_l - \frac{1}{2} \right) \hat{c}_{l-1}^\dagger \hat{c}_{l-2} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

Zum Ausdruck der wechselwirkungsfreien Energiestromdichte $\langle [\hat{h}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_- \rangle$ kommen also noch Terme hinzu, die von der Wechselwirkung abhängen. Im Gegensatz zu den bilinearen Termen bei der Ladungsstromdichte erhalten wir hier Erwartungswerte der Form $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta \rangle$,

² In dieser Arbeit kann immer aus dem Kontext entnommen werden, wie die jeweiligen Erwartungswerte bestimmt wurden.

welche wir mit den Methoden aus Kapitel 2 nicht auswerten können. Deshalb berechnen wir in dieser Arbeit nur Energieströme durch Systeme, bei denen die Wechselwirkung der Elektronen mit der Hartree-Fock-Näherung behandelt wurde. So können wir das Wick'sche Theorem [47]

$$\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta \rangle = \langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle \langle \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\delta \rangle - \langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\delta \rangle \langle \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\beta \rangle \quad (3.21)$$

verwenden und erhalten wieder Erwartungswerte mit bilinearen Termen. Der besseren Übersichtlichkeit halber und weil die Energiestromdichte symmetrisch ist, geben wir hier nur die Terme mit Wechselwirkung an, welche die Gitterplätze $\geq l$ betreffen. Dies wird mit einem „+“ Index gekennzeichnet und wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{h}_{l,U}, \hat{H}_{\text{ges},U}]_- \rangle_+ &= \frac{U_l t_{l+1}}{2\hbar} \left[\left(\langle \hat{n}_l \rangle - \frac{1}{2} \right) \langle \hat{c}_{l+2}^\dagger \hat{c}_{l+1} \rangle - \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} \rangle \langle \hat{c}_{l+2}^\dagger \hat{c}_l \rangle - \text{h.c.} \right] \\ &+ \frac{U_{l+1} t_l}{2\hbar} \left[\left(\langle \hat{n}_{l+2} \rangle - \frac{1}{2} \right) \langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l \rangle - \langle \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_{l+2} \rangle \langle \hat{c}_{l+2}^\dagger \hat{c}_l \rangle - \text{h.c.} \right] + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{h}_l, \hat{H}_{\text{ges}}]_- \rangle_+ \end{aligned} \quad (3.22)$$

Diese Gleichung beinhaltet alle Informationen um den Energiestrom, beispielsweise zwischen Platz l und $l+1$, bestimmen zu können. Die Ausdrücke der Energieströme werden in Gl. (3.23) und Gl. (3.24) konkret angegeben.

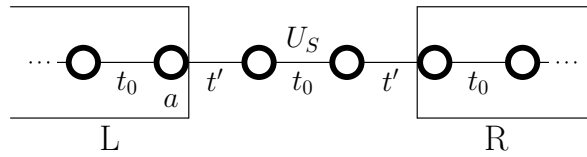


Abbildung 3.2: Zweiplatzmodell, bei dem Elektronen zwischen den beiden Plätzen in der Streuregion mit U_S wechselwirken können.

Zunächst drängt sich hier allerdings die Frage auf, ob wir das gleiche Ergebnis erhalten, wenn wir die Energiestromdichte, ausgehend vom Hamiltonoperator in der Hartree-Fock-Näherung $\hat{H}_{\text{ges, HF}}$, berechnen. Dazu muss der Kommutator $i\langle [\hat{h}_{l, \text{HF}}, \hat{H}_{\text{ges, HF}}]_- \rangle_+ / \hbar$ ausgewertet werden, wobei $\hat{h}_{l, \text{HF}}$ der lokale Hamiltonoperator des l -ten Gitterplatzes in der Hartree-Fock-Näherung ist. Das Ergebnis ist das gleiche wie in Gl. (3.22). Weil jetzt aber $\hat{h}_{l, \text{HF}}$ wegen der Erwartungswerte zeitabhängig ist, darf der Term $\langle \partial \hat{h}_{l, \text{HF}} / \partial t \rangle$ aus dem Ehrenfest-Theorem (2.16) nicht länger vernachlässigt werden. Um Abschätzen zu können welche Rolle der Term $\langle \partial \hat{h}_{l, \text{HF}} / \partial t \rangle$ bei der Energiestromdichte spielt, betrachten wir die Erwartungswerte $\langle \hat{n}_l \rangle$ in der Streuregion genauer. Dazu berechnen wir numerisch $\langle \hat{n}_{a+1} \rangle$ und $\langle \hat{n}_{a+2} \rangle$ des Systems aus Abb. 3.2 mit zwei Gitterplätzen in der Streuregion (Zweiplatzmodell), bei denen Elektronen mit U_S wechselwirken können. Des Weiteren soll die Verbindung zwischen den Zuleitungen und dem zentralen Bereich $t' = 0.5t_0$ betragen und kein Potential $\varepsilon_{L,R} = 0 = \varepsilon_S$ verwendet werden.

In Abb. 3.3 sind nun die Erwartungswerte $\langle \hat{n}_{a+1} \rangle$ und $\langle \hat{n}_{a+2} \rangle$ auf die Zeit mit der Wechselwir-

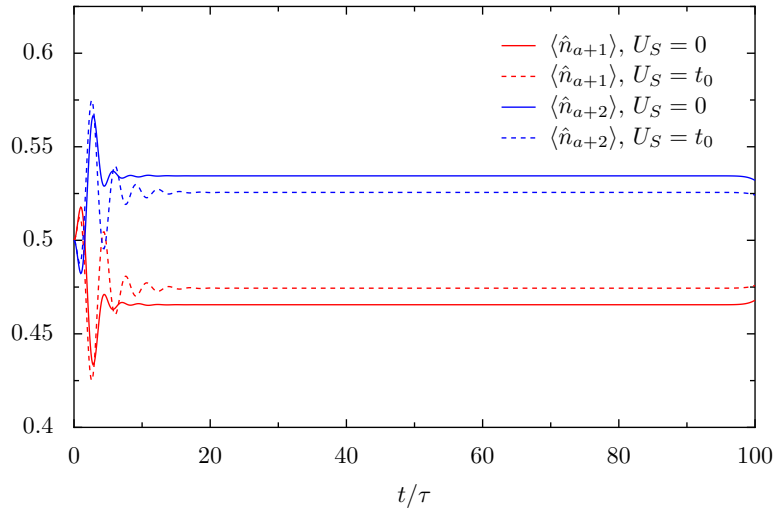


Abbildung 3.3: Erwartungswerte $\langle \hat{n}_{a+1} \rangle$ und $\langle \hat{n}_{a+2} \rangle$ des Zweiplatzmodells aus Abb. 3.2, aufgetragen nach der Zeit mit unterschiedlichen Wechselwirkungen $U_S = 0$ und $U_S = t_0$. Zusätzlich wurden die Parameter $t' = 0.5t_0$ und $\varepsilon_{L,R} = 0 = \varepsilon_S$ bei einer inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 8/t_0$ und einer Spannung $eV = t_0$ verwendet.

kung $U_S = 0$ und $U_S = t_0$ aufgetragen. Man kann erkennen, dass die Werte in der stationären Phase beim System mit Wechselwirkung ungefähr gleich schnell einen konstanten Wert erreichen wie im wechselwirkungsfreien Fall. Da wir aber nur die stationäre Phase der Ströme benötigen, und diese sehr glatt sind, kann der Term $\langle \partial \hat{h}_{l,\text{HF}} / \partial t \rangle$ vernachlässigt werden³. Also spielt es auch bei der Energiestromdichte keine Rolle, ob die Hartree-Fock-Näherung am Hamiltonoperator durchgeführt wird oder erst nachträglich bei der Energiestromdichte und somit ist Gl. (3.22) für beide Fälle gültig.

Damit ist der Energiestrom⁴ mit der Hartree-Fock-Näherung von der linken Zuleitung in die Streuregion (zwischen Platz a und $a+1$) aus Abb. 3.1 gegeben durch

$$J_{LS}^{E,\text{HF}} = J_{LS}^E + \frac{U_S}{2} \left[\left(\langle \hat{n}_{a+2} \rangle - \frac{1}{2} \right) \frac{I_{LS}}{e} + \frac{it'_L}{\hbar} (\langle \hat{c}_{a+2}^\dagger \hat{c}_{a+1} \rangle \langle \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_{a+2} \rangle - \text{h.c.}) \right] + \frac{iU'}{2\hbar} \left[t_1 (\langle \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_{a+2} \rangle \langle \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a \rangle - \text{h.c.}) + t_L (\langle \hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_a \rangle \langle \hat{c}_{a-1}^\dagger \hat{c}_{a+1} \rangle - \text{h.c.}) \right]. \quad (3.23)$$

3 Die Erwartungswerte der Form $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ mit $\alpha \neq \beta$ erreichen genauso schnell einen konstanten Wert wie $\langle \hat{n}_\alpha \rangle$. Da diese allerdings im Allgemeinen komplexe Zahlen sind, muss separat der imaginäre und reelle Teil betrachtet werden.

4 Wie bereits im zweiten Kapitel diskutiert wurde, ist in eindimensionalen Systemen die Energiestromdichte gleich dem Energiestrom (gilt natürlich auch für den Ladungsstrom).

Analog erhalten wir für den Energiestrom von der Streuregion in das rechte Lead

$$J_{SR}^{E,\text{HF}} = J_{SR}^E + \frac{U_S}{2} \left[\left(\langle \hat{n}_{b-2} \rangle - \frac{1}{2} \right) \frac{I_{SR}}{e} + \frac{it'_R}{\hbar} (\langle \hat{c}_{b-1}^\dagger \hat{c}_{b-2} \rangle \langle \hat{c}_{b-2}^\dagger \hat{c}_b \rangle - \text{h.c.}) \right] + \frac{iU'}{2\hbar} \left[t_{N_S-1} (\langle \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} \rangle \langle \hat{c}_{b-2}^\dagger \hat{c}_b \rangle - \text{h.c.}) + t_R (\langle \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_{b-1} \rangle \langle \hat{c}_{b-1}^\dagger \hat{c}_{b+1} \rangle - \text{h.c.}) \right]. \quad (3.24)$$

Bei den numerischen Berechnungen bilden wir wieder den Mittelwert der beiden Ströme $J_{LS}^{E,\text{HF}}$ und $J_{SR}^{E,\text{HF}}$ und erhalten

$$J^{E,\text{HF}} = \frac{J_{LS}^{E,\text{HF}} + J_{SR}^{E,\text{HF}}}{2}. \quad (3.25)$$

Im nächsten Schritt betrachten wir die Auswirkungen der Wechselwirkung auf den Ladungsstrom in der Hartree-Fock-Näherung genauer. Dazu verwenden wir das Zweiplatzmodell aus Abb. 3.2 mit den Hoppingparametern $t' = 0.5t_0$ und keinem Potential $\varepsilon_{L,R} = \varepsilon_S = 0$ mit $\beta_{L,R} = 8/t_0$. Das $I(V)$ -Diagramm ist für verschiedene Werte von U_S in Abb. 3.4 zu sehen. Man kann deutlich erkennen, dass im Bereich bis ca. $eV \sim 2t_0$ die Ströme mit steigender abstoßender Wechselwirkung (positives U_S) abnehmen, und bei attraktiver Wechselwirkung (negatives U_S) zunehmen. Für sehr große Spannungen nehmen alle Ströme näherungsweise den gleichen konstanten Wert an.

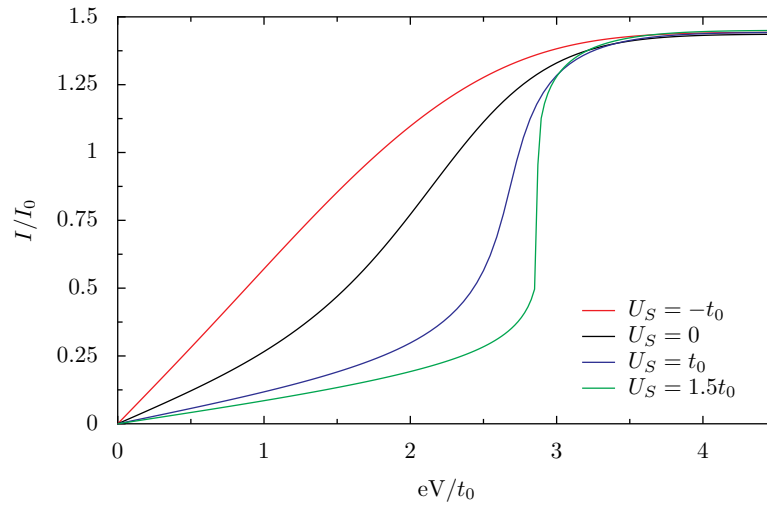


Abbildung 3.4: $I(V)$ -Diagramm des Zweiplatzmodells aus Abb. 3.2 für verschiedene Wechselwirkungen U_S . Zudem wurden die Parameter $t' = 0.5t_0$ und $\varepsilon_{L,R} = \varepsilon_S = 0$ bei einer inversen Temperatur von $\beta_{L,R} = 8/t_0$ verwendet.

Im nächsten Abschnitt befassen wir uns näher mit der Hubbard-Stratonovich-Transformation, mit der die Ladungsströme durch das Zweiplatzmodell exakt berechnet werden können. Damit werden wir herausfinden, dass die Hartree-Fock-Näherung die Wechselwirkung bis zu einer Spannung von ca. $eV \sim 2t_0$ sehr gut beschreibt, allerdings die von U_S unabhängigen

Werte aller Ströme bei großen Spannungen Artefakte der Hartree-Fock-Näherung darstellen.

3.2.2 Hubbard-Stratonovich-Transformation

Um die Ladungsströme durch die Streuregion des Zweiplatzmodells aus Abbildung 3.2 mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation berechnen zu können, teilen wir als ersten Schritt den Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{ges},U}$ aus Gl. (3.4) in einen wechselwirkungsfreien Operator \hat{T} und einen Operator \hat{V} mit Wechselwirkung folgendermaßen auf:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ges},U} = \hat{H}_L + \hat{H}_{LS} + \hat{H}_{SR} + \hat{H}_R + t_0(\hat{c}_{a+2}^\dagger \hat{c}_{a+1} + \text{h.c.}) + \varepsilon_S(\hat{n}_{a+1} + \hat{n}_{a+2}) \\ + U_S \left(\hat{n}_{a+2} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{a+1} - \frac{1}{2} \right) = \hat{T} + \hat{V}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

wobei \hat{H}_L und \hat{H}_R die Hamiltonoperatoren der Zuleitungen (Gl. (2.4) und (2.5)) mit den Parametern $t_{L,R} = t_0$ und $\varepsilon_{L,R} = 0$ darstellen. Zudem sind \hat{H}_{LS} und \hat{H}_{SR} die Ankopp-
lungsterme der Zuleitungen an die Streuregion aus Gl. (2.7) und (2.8) mit den Parametern $t'_{L,R} = t'$.

Bei der Hubbard-Stratonovich-Transformation werden wir, wie in Abschnitt 2.3, die Zeitentwicklung des Dichteoperators verwenden. Wir beginnen also wieder mit dem zeitabhängigen Dichteoperator aus Gl. (2.36)

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}_{\text{ges},U}t} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}_{\text{ges},U}t} \quad (3.27)$$

und nehmen an, dass das System zum Zeitpunkt $t < 0$ wechselwirkungsfrei ist, sodass wir $\hat{\rho}(0)$ aus Gl. (2.33) verwenden können. Um den wechselwirkenden Hamiltonoperator $H_{\text{ges},U}$ behandeln zu können, trennen wir die Operatoren \hat{T} und \hat{V} wie folgt:

$$e^{-i\hat{H}_{\text{ges},U}t} = \left(e^{-i\hat{H}_{\text{ges},U}\Delta t} \right)^M = \left(e^{-i(\hat{T}+\hat{V})\Delta t} \right)^M \approx \left(e^{-i\hat{T}\Delta t/2} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\hat{T}\Delta t/2} \right)^M, \quad (3.28)$$

wobei $t = M\Delta t$. Da \hat{T} und \hat{V} im Allgemeinen nicht vertauschen, ist die Aufspaltung der zeitabhängigen Exponentialfunktionen nur im Grenzfall $M \rightarrow \infty$ exakt. Mit der symmetrischen Schreibweise in Gl. (3.28) wird der Fehler bei endlichen Werten von M um eine Größenordnung in Δt geringer als bei einer asymmetrischen Schreibweise und liegt dann bei $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ [49].

Bisher wurden lediglich die Exponentialfunktionen in eine andere Form gebracht. Nun führen wir an der Exponentialfunktion mit dem Operator \hat{V} die Hubbard-Stratonovich-Transformation durch, um nur bilineare Terme der Form $\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta$ zu erhalten. So können wir

anschließend die Ergebnisse der Zeitenwicklung des Dichteoperators wie im Abschnitt 2.3 verwenden. Dazu formen wir zunächst das Produkt der Besetzungszahloperatoren wie folgt um⁵

$$\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta = -\frac{1}{2} (\hat{n}_\alpha^2 - 2\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta + \hat{n}_\beta^2 - \hat{n}_\alpha^2 - \hat{n}_\beta^2) = -\frac{1}{2} [(\hat{n}_\alpha - \hat{n}_\beta)^2 - \hat{n}_\alpha - \hat{n}_\beta], \quad (3.29)$$

und erhalten dann für den wechselwirkenden Operator

$$\hat{V} = \frac{1}{4} U_S - \frac{1}{2} U_S (\hat{n}_{a+2} - \hat{n}_{a+1})^2. \quad (3.30)$$

Damit bringen wir die Exponentialfunktion mit dem Operator \hat{V} in die Form

$$e^{-i\hat{V}\Delta t} = e^{-iU_S\Delta t/4} e^{iU_S(\hat{n}_{a+1}-\hat{n}_{a+2})^2\Delta t/2} = \frac{1}{2} e^{-iU_S\Delta t/4} \sum_{\sigma=\pm 1} e^{i\alpha\sigma(\hat{n}_{a+1}-\hat{n}_{a+2})}, \quad (3.31)$$

wobei σ eine Ising-Variable darstellt. Der komplexe Parameter α muss im Folgenden angepasst werden, damit Gl. (3.31) erfüllt ist. Da die Besetzungszahlen nur die Werte $n = 0, 1$ annehmen können, gehen wir nun die resultierenden vier Möglichkeiten separat durch. Für die Fälle $n_{a+1} = n_{a+2} = 0$ und $n_{a+1} = n_{a+2} = 1$ ist die Gl. (3.31) erfüllt. Betrachtet man die Fälle $n_{a+1} = 1, n_{a+2} = 0$ und $n_{a+1} = 0, n_{a+2} = 1$ erhält man jeweils für Gl. (3.31)

$$e^{iU_S\Delta t/2} = \frac{1}{2} (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}) = \cos(\alpha) \quad (3.32)$$

und damit

$$\alpha = \arccos(e^{iU_S\Delta t/2}). \quad (3.33)$$

Also erhalten wir für die zeitabhängige Exponentialfunktion

$$e^{-i\hat{H}_{\text{ges},U}t} = \frac{e^{-iU_S t/4}}{2^M} \sum_{\{\sigma_m\}} \prod_{m=1}^M \hat{U}(\sigma_m), \quad (3.34)$$

wobei

$$\hat{U}(\sigma_m) = e^{-i\hat{T}\Delta t/2} e^{-i\alpha\sigma_m(\hat{n}_{a+1}-\hat{n}_{a+2})} e^{-i\hat{T}\Delta t/2}. \quad (3.35)$$

Bei der Summe in Gl. (3.34) wird über sämtliche Kombinationen von σ_m summiert.

Analog ist die adjungierte Exponentialfunktion gegeben durch

$$e^{i\hat{H}_{\text{ges},U}t} = \frac{e^{iU_S t/4}}{2^M} \sum_{\{\sigma_m\}} \prod_{m=1}^M \hat{U}^\dagger(\sigma_m). \quad (3.36)$$

5 Bei Fermionen gilt $\hat{n}_\alpha^2 = \hat{n}_\alpha$.

Da nun der Operator \hat{V} in der zeitabhängigen Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$ in bilineare Terme aufgeteilt wurde, kann der Erwartungswert eines Operators $\hat{O} = \sum_{ij} \hat{c}_i^\dagger o_{ij} \hat{c}_j$ ähnlich wie in Abschnitt 2.3.2 berechnet werden, wobei wir wieder von dem Ausdruck $\langle \hat{O} \rangle = \text{Sp} [\hat{\rho}(t) \hat{O}] / \text{Sp} [\hat{\rho}(t)]$ ausgehen. Da die Spur eine lineare Operation ist, können wir die Summen über die Ising-Variablen mit der Spur vertauschen und erhalten

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \frac{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [\hat{U}(\sigma_M) \dots \hat{U}(\sigma_1) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(\sigma'_1) \dots \hat{U}^\dagger(\sigma'_M) \hat{O}]}{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [\hat{U}(\sigma_M) \dots \hat{U}(\sigma_1) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(\sigma'_1) \dots \hat{U}^\dagger(\sigma'_M)]}, \\ &= \frac{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m) \hat{O}]}{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

wobei sich hier die Vorfaktoren $e^{\pm i U_{st}/4} / 2^M$ wegheben und der Operator $\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)$ durch

$$\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m) = \hat{U}(\sigma_M) \dots \hat{U}(\sigma_1) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(\sigma'_1) \dots \hat{U}^\dagger(\sigma'_M) \quad (3.38)$$

gegeben ist. Als nächsten Schritt erweitern wir den Zähler von Gl. (3.37) mit dem Term $\text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]$ und erhalten

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \frac{\text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m) \hat{O}]}{\text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]} \text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]}{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]}. \quad (3.39)$$

Mit dieser Umformung können wir den Bruch im Zähler, analog zum Abschnitt 2.3.2, wie folgt umschreiben:

$$\frac{\text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m) \hat{O}]}{\text{Sp} [\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)]} = \text{Sp} [(\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m))^{-1} A(\sigma_m, \sigma'_m) O], \quad (3.40)$$

wobei $A(\sigma_m, \sigma'_m)$ und O die zugehörigen Matrizen zu den Operatoren $\hat{A}(\sigma_m, \sigma'_m)$ und \hat{O} sind. Damit ist der Erwartungswert des Operators \hat{O} mit Gl. (2.43) wie folgt gegeben:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \text{Sp} [(\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m))^{-1} A(\sigma_m, \sigma'_m) O] \det [\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m)]}{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \det [\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m)]}. \quad (3.41)$$

Da wir für die Stromdichten die Green'sche Funktion für Einteilchensysteme bestimmen möchten, ersetzen wir \hat{O} durch $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$ und erhalten mit Gl. (2.47)

$$\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} (\delta_{ij} - [(\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m))^{-1}]_{ji}) \det [\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m)]}{\sum_{\{\sigma_m\}} \sum_{\{\sigma'_m\}} \det [\mathbb{1} + A(\sigma_m, \sigma'_m)]}. \quad (3.42)$$

Weil wir aber in diesem Formalismus über alle möglichen Kombinationen der Ising-Variablen σ_m und σ'_m summieren, bestehen Zähler und Nenner in Gl. (3.42) aus 4^M Termen. Dies ist aber,

selbst für sehr leistungsstarke Computer, nur bis zu Werten von $M \sim 10$ möglich. Folglich sind wir in der Zeitentwicklung des Dichteoperators auf einen endlichen Bereich $t \lesssim 10\Delta t$ beschränkt, wobei Δt wiederum klein genug gewählt werden muss, um die Näherung in Gl. (3.28) zu rechtfertigen. Die Hubbard-Stratonovich-Transformation liefert uns also die exakten Ladungsströme durch das Zweiplatzmodell, ist aber mit sehr hohem Rechenaufwand verbunden.

3.2.3 Hartree-Fock vs. Hubbard-Stratonovich

In diesem Abschnitt vergleichen wir die Ladungsströme durch das Zweiplatzmodell, berechnet mit der Hartree-Fock-Näherung und der Hubbard-Stratonovich-Transformation. Dazu betrachten wir zunächst in Abb. 3.5 die Ladungsströme als Funktion der Zeit. Hier wurden die Parameter $t' = 0.5t_0$ und $\varepsilon_S = 0$ bei einer inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 8/t_0$ für verschiedene Spannungen bei einer Länge der Zuleitungen von $N_{L,R} = 20$ betrachtet.

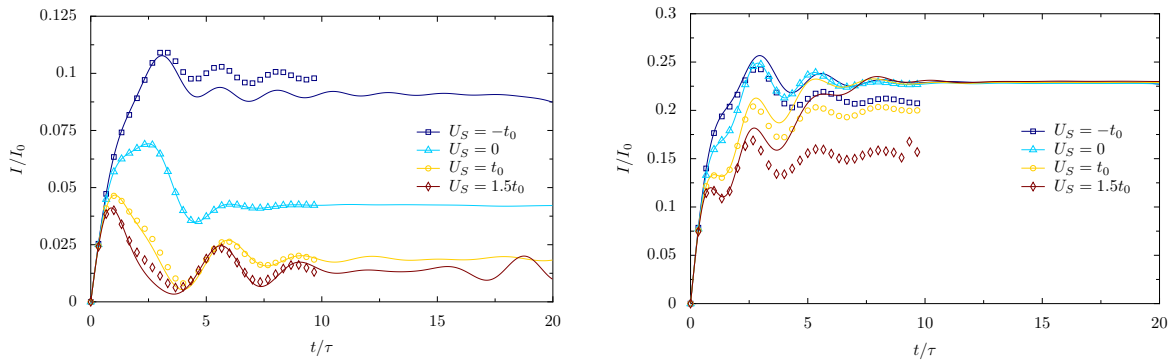


Abbildung 3.5: Ladungsströme als Funktion der Zeit durch das Zweiplatzmodell aus Abb. 3.2 für verschiedene Wechselwirkungen U_S . Wir vergleichen hier die Hartree-Fock-Näherung (Linien) mit der Hubbard-Stratonovich-Transformation (Symbole) mit den Parametern $t' = 0.5t_0$, $\beta_{L,R} = 8/t_0$ und der Spannung $eV = t_0$ (linker Graph) und $eV = 4t_0$ (rechter Graph). Zudem wurden hier bei beiden Methoden $N_{L,R} = 20$ Gitterplätze für die Zuleitungen gewählt.

Man kann in Abb. 3.5 sehen, dass bei einer Spannung $eV = t_0$ (linke Abbildung) für abstoßende (positive) Wechselwirkungen die Hartree-Fock-Näherung (Linien) sehr gut mit den Ergebnissen aus der Hubbard-Stratonovich-Transformation (Symbole) übereinstimmen. Bei hohen Spannungen haben wir bereits herausgefunden, dass die mit der Hartree-Fock-Näherung berechneten Ladungsströme fast nicht von der Stärke der Wechselwirkung U_S abhängen. Betrachten wir die rechte Abbildung in 3.5 bei einer Spannung von $eV = 4t_0$ können wir erkennen, dass dieses Phänomen von der Hubbard-Stratonovich-Transformation nicht bestätigt wird und es deswegen ein Artefakt der Hartree-Fock-Näherung darstellt. Beachtlich ist jedoch, dass beim nicht-trivialen Einschwingvorgang der Ladungsströme⁶ bei beiden Graphen

⁶ Zeitlicher Bereich, bis nahezu das Plateau des Ladungsstroms erreicht ist.

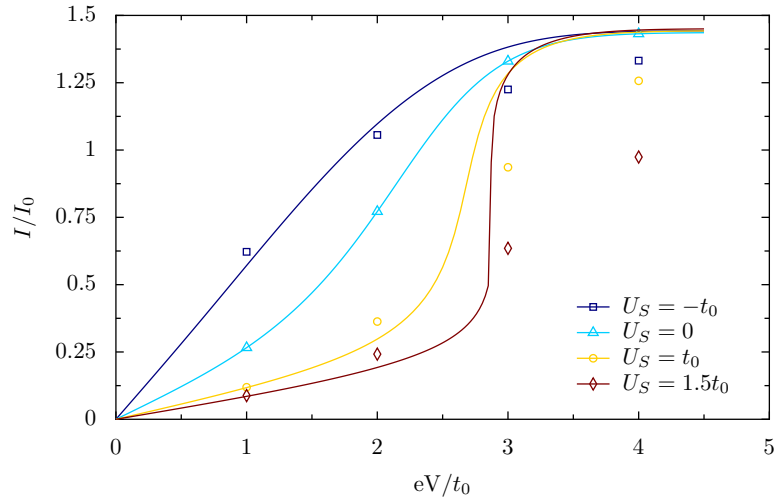


Abbildung 3.6: Mit der Hartree-Fock-Näherung berechnetes $I(V)$ -Diagramm (Linien) aus Abb. 3.4, verglichen mit den Ergebnissen aus der Hubbard-Stratonovich-Transformation (Symbole).

in Abb. 3.5 die Hartree-Fock-Näherung und die Hubbard-Stratonovich-Transformation nahezu die gleichen Ergebnisse liefern.

In Abb. 3.6 wurden die stationären Ströme der Hubbard-Stratonovich-Transformation für verschiedene Spannungen und Wechselwirkungen abgeschätzt und werden hier mit den Ergebnissen aus der Hartree-Fock-Näherung aus Abb. 3.4 verglichen. Man kann also festhalten, dass beim Zweiplatzmodell die Hartree-Fock-Näherung bei kleinen Spannungen die Wechselwirkung tendenziell richtig wiedergibt, bei großen Spannungen allerdings Artefakte auftreten.

3.3 Der Landauer-Büttiker-Formalismus in Hartree-Fock-Näherung

In diesem Abschnitt berechnen wir die Transmission eines wechselwirkenden Systems mit der Hartree-Fock-Näherung und nutzen dann den Landauer-Büttiker-Formalismus, um die Ladungs- und Energieströme zu bestimmen. Wie bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators muss bei der Hartree-Fock-Näherung die Green'sche Funktion für Einteilchensysteme $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ selbstkonsistent bestimmt werden. Da beim Landauer-Büttiker-Formalismus direkt die stationären Ströme (ohne Zeitabhängigkeit) berechnet werden, ist das Ziel des nächsten Abschnitts, die Green'sche Funktion selbstkonsistent zu berechnen, ohne explizit eine Zeitentwicklung durchführen zu müssen.

3.3.1 Selbstkonsistente Green'sche Funktion

Um die Transmission des wechselwirkenden Systems aus Abb. 3.7 in der Hartree-Fock-Näherung selbstkonsistent zu bestimmen, gehen wir zunächst vom wechselwirkungsfreien System ($U' = U_S = 0$) aus und berechnen die Transmission wie in Abschnitt 2.4.2. Beim Lösen des Gleichungssystems aus (2.61) können wir neben den Koeffizienten B und C auch die Eigenzustände der Streuregion ψ_j im Ortsraum bestimmen. Da wir zudem bereits wis-

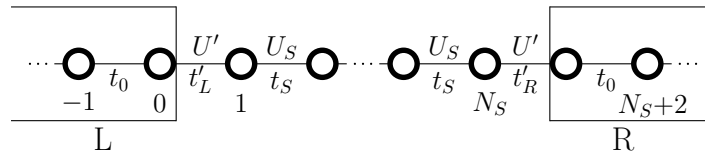


Abbildung 3.7: System mit der Wechselwirkung U' zwischen den Elektronen auf den Gitterplätzen der Zuleitungen und dem zentralen Bereich und die Wechselwirkung U_S der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen in der Streuregion.

sen, dass die Eigenzustände in den Zuleitungen ebene Wellen sind, sind die Zustände des Systems im Ortsraum für eine einfallende Welle aus der linken Zuleitung wie folgt gegeben:

$$\langle j | \Psi_L(k) \rangle = \begin{cases} A_L e^{ikj} + B_L e^{-ikj} & j \leq 0 \\ \psi_j & 0 < j \leq N_S \\ C_L e^{ikj} & j > N_S \end{cases} \quad (3.43)$$

Die Amplitude der einfallenden Welle wird hier wieder auf $A_L = 1$ gesetzt und der Index L steht für die von links einlaufende ebene Welle. Die Streuzustände aus Gl. (3.43) werden in der folgenden Formel verwendet, um die Green'sche Funktion im stationären Bereich zu berechnen [50]:

$$\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_m \rangle = \sum_{\alpha=L,R} \sum_k f_\alpha(E_k) \langle m | \Psi_\alpha(k) \rangle \langle \Psi_\alpha(k) | l \rangle. \quad (3.44)$$

Hier wird mit $\alpha = L$ über die Eigenzustände $\langle j | \Psi_L(k) \rangle$ summiert, die mit der Fermi-Verteilung $f_L(E_k)$ multipliziert werden. Zudem werden hier die Eigenzustände $\langle j | \Psi_R(k) \rangle$ benötigt, welche mit $\alpha = R$ eine einfallende Well aus der rechten Zuleitung wie folgt

$$\langle j | \Psi_R(k) \rangle = \begin{cases} A_R e^{ikj} + B_R e^{-ikj} & j > N_S \\ \psi_j & N_S \geq j > 0 \\ C_R e^{ikj} & j \leq 0 \end{cases} \quad (3.45)$$

beschreibt und mit $f_R(E_k)$ multipliziert wird. Die Fermi-Verteilungen sind durch die Temperaturen und chemischen Potentiale der Zuleitungen mit $f_{L,R} = (\exp(\beta_{L,R}(E_k - \mu_{L,R})) + 1)^{-1}$ gegeben.

In Abb. 3.8 ist ein Programmablaufplan abgebildet, welcher zeigt, wie die Transmission der Streuregion aus Abb. 3.7 mit Wechselwirkung (Hartree-Fock-Näherung) und die zugehörigen Ströme bestimmt werden. Dafür werden zunächst die Erwartungswerte $\langle \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \rangle$ (Gl. (3.44)) und die Transmission $\mathcal{T}_0(E)$ des wechselwirkungsfreien Systems bestimmt. Als nächsten Schritt werden die Green'schen Funktionen in den Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{ges, HF}}$ eingesetzt und damit die „neuen“ Green'schen Funktionen und die Transmission $\mathcal{T}(E)$ der Streuregion berechnet. Nun wird abgefragt, ob sich die Transmissionen $\mathcal{T}_0(E)$ und $\mathcal{T}(E)$ für jede Energie E höchstens um den Wert ϵ unterscheiden. Falls dies nicht zutrifft, ist $\mathcal{T}(E)$ die „neue“ Transmission $\mathcal{T}_0(E)$ und das Programm springt wieder an den Punkt, an dem die Green'schen Funktionen in den Hamiltonoperator eingesetzt werden. Ist die Bedingung $|\mathcal{T}(E) - \mathcal{T}_0(E)| < \epsilon$ erfüllt, werden die stationären Ströme berechnet und anschließend ausgegeben.

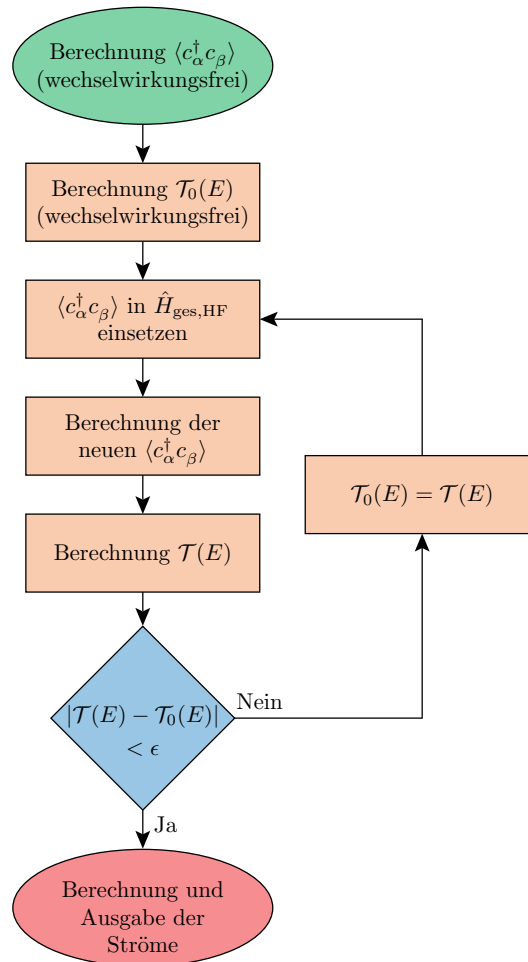


Abbildung 3.8: Programmablaufplan zur Berechnung der Ströme und Transmissionen des Systems aus Abb. 3.7 mit Wechselwirkung in der Hartree-Fock-Näherung.

Da wir das System mit der Hartree-Fock-Näherung durch Einteilchenzustände beschreiben, können wir weiterhin zur Berechnung der Ladungs-, Energie- und Wärmeströme die Landauer-

Büttiker-Formeln aus Gl. (2.52)-(2.54) verwenden [8].

Im nächsten Abschnitt vergleichen wir die Ströme in der Hartree-Fock-Näherung, welche mit der Zeitentwicklung der Dichtematrix und der Landauer-Büttiker-Formel berechnet wurden und werden wieder eine sehr gute Übereinstimmung feststellen. Zudem betrachten wir die Transmissionen des Zweiplatzmodells genauer, um die Charakteristik der Ströme im $I(V)$ -Diagramm aus Abb. 3.4 besser zu verstehen.

3.3.2 Landauer-Büttiker-Formalismus und das Zweiplatzmodell

In wechselwirkungsfreien Systemen haben wir für die stationären Ströme bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators und beim Landauer-Büttiker-Formalismus nahezu die gleichen Werte erhalten. Um dies für Systeme in der Hartree-Fock-Näherung zu überprüfen, vergleichen

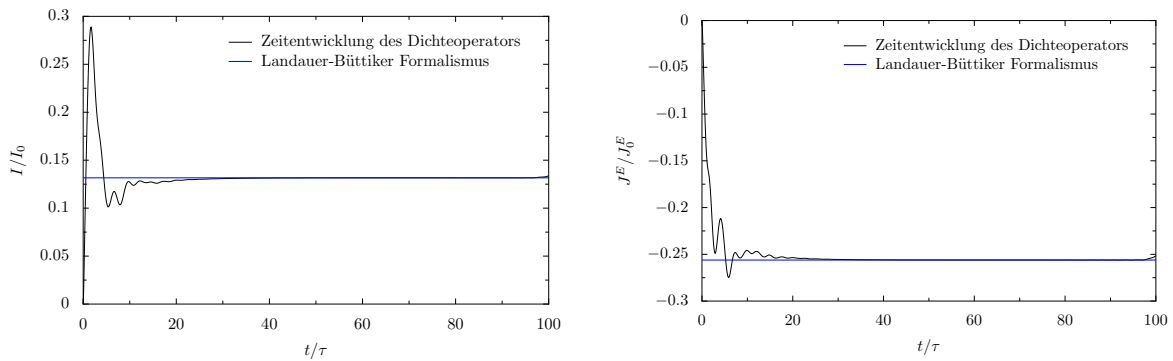


Abbildung 3.9: Vergleich des Ladungs- und Energiestroms, berechnet mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators und der Landauer-Büttiker-Formel, für das Zweiplatzmodell mit den Wechselwirkungen $U_S = 1.4t_0$ und $U' = 0.8t_0$. Des Weiteren wurden die Parameter $t' = 0.6t_0$, $t_S = 0.8t_0$ und $\varepsilon_S = -0.4t_0$ bei einer Spannung $eV = t_0$ und inversen Temperaturen $\beta_L = 20/t_0$ und $\beta_R = 1/t_0$ gewählt.

wir in Abb. 3.9 den Ladungs- und Energiestrom der Zeitentwicklung des Dichteoperators mit den Strömen der Landauer-Büttiker-Formel für das Zweiplatzmodell mit den Wechselwirkungen⁷ $U' = 0.8t_0$ und $U_S = 1.4t_0$ und einer Länge der Streuregion von $N_S = 5$. Hier wurden die Parameter willkürlich mit $t' = 0.6t_0$, $t_S = 0.8t_0$ und $\varepsilon_S = -0.4t_0$ bei einer Spannung von $eV = t_0$ und inversen Temperaturen $\beta_L = 20/t_0$ und $\beta_R = 1/t_0$ festgelegt. Bei der Zeitentwicklung des Dichteoperators wurden die Ströme mit einer Größe der Zuleitungen von $N_{L,R} = 100$ verwendet. Trotz der vielen verschiedenen Parameter, welche zu massiven Änderungen der Ströme führen, stimmen die stationären Ströme sehr gut überein. Der Fehler beläuft sich hier, wie bereits beim wechselwirkungsfreien System, auf maximal $\sim 10^{-3}$.

⁷ Wir hatten das Zweiplatzmodell aus Abb. 3.2 ohne die Wechselwirkung der Elektronen zwischen den Zuleitungen und der Streuregion U' und für den Hoppingparameter $t_S = t_0$ definiert, führen diese hier aber ein, damit gezeigt werden kann, dass die Ströme für sämtliche Fälle übereinstimmen.

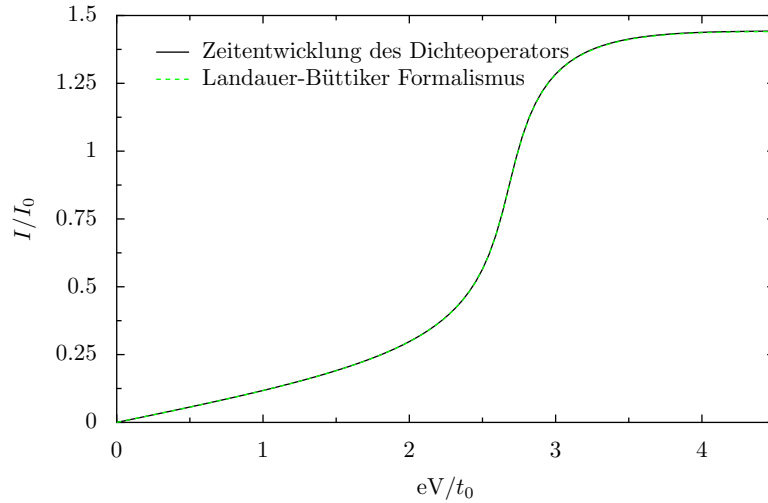


Abbildung 3.10: $I(V)$ -Diagramm aus Abb. 3.6, berechnet mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators und der Landauer-Büttiker-Formel mit $U_S = t_0$.

Es ist daher auch nicht verwunderlich, dass wir beim $I(V)$ -Diagramm des Zweiplatzmodells mit den Parametern aus Abb. 3.6 die gleichen Werte erhalten, egal ob diese mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators oder der Landauer-Büttiker-Formel berechnet wurden, was man in Abb. 3.10 sehen kann. Hier ist der Strom auf die Spannung mit der Wechselwirkung $U_S = t_0$ aufgetragen. Dennoch können die Werte leicht variieren, wenn man den Sprung im $I(V)$ -Diagramm bei großen Wechselwirkungen ($U_S \geq 1.5t_0$) und kleinen Temperaturen ($\beta_{L,R} = 50/t_0$) in Abb. 3.11 näher betrachtet. Die selbstkonsistent berechnete Green'sche Funktion aus Gl. (3.44), welche benötigt wird, um die Ströme mit der Landauer-Büttiker-Formel für ein $I(V)$ -Diagramm bestimmen zu können, kann auf verschiedene Wege berechnet werden.

Man kann für jeden Wert der Spannung vom wechselwirkungsfreien System ausgehen und dann die Wechselwirkung selbstkonsistent in der Hartree-Fock-Näherung berechnen (grüne Linie in Abb. 3.11), man kann aber auch nur bei einer Spannung $eV = 0$ vom wechselwirkungsfreien System ausgehen und für jeden weiteren Wert für die Spannung die Green'sche Funktion des vorher berechneten Werts der Spannung verwenden und anschließend die neue Green'sche Funktion selbstkonsistent bestimmen (blaue Linie). Dies funktioniert natürlich auch, wenn man vom größten Wert der Spannung beginnt und dann Werte mit kleinerer Spannung berechnet (schwarze Linie). Die letzten zwei Methoden können als System mit adiabatisch ansteigender und sinkender Spannung bezeichnet werden, was in der Abbildung mit den Pfeilen angedeutet wird.

Normalerweise spielt es keine Rolle, welche Methode man verwendet, da man die gleichen Werte für die Ströme erhält. Im $I(V)$ -Diagramm (s. Abb. 3.11) erkennt man jedoch, dass der Strom mit der adiabatisch sinkenden Spannung und der Strom, bei dem jeder Wert der Span-

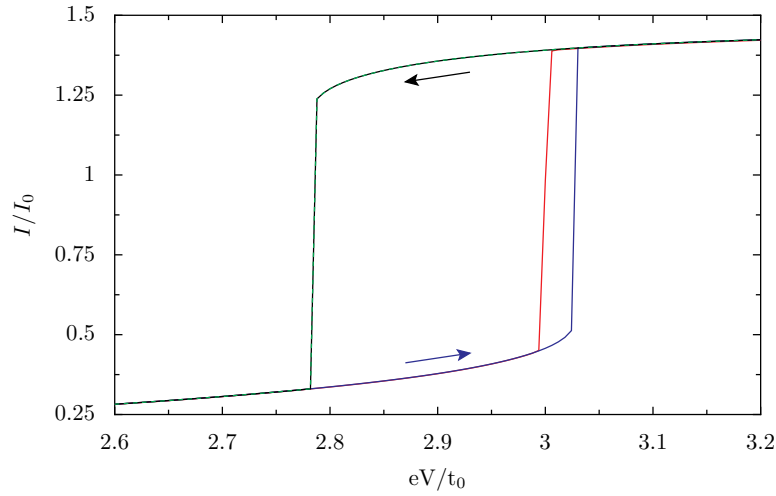


Abbildung 3.11: $I(V)$ -Diagramm des Zweiplatzmodells im Bereich des Sprungs bei $U_S = 1.5t_0$ und $\beta = 50/t_0$. Die Ladungsströme wurden mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators (rot) und mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus (selbstkonsistente Green'sche Funktionen) bestimmt. Zur Berechnung der Green'schen Funktionen ging man hier einerseits für jeden Wert der Spannung vom wechselwirkungsfreien System aus (grün). Andererseits auch für adiabatisch ansteigende (blau) und sinkende (schwarz) Werte der Spannung, was durch die Pfeile angedeutet wird.

nung ausgehend vom wechselwirkungsfreien System berechnet wurde jeweils den Sprung bei $eV \approx 2.77t_0$ haben. Hingegen liegt der Sprung beim Strom mit adiabatisch steigender Spannung bei $eV \approx 3.03t_0$. Die Existenz von multiplen Lösungen im $I(V)$ -Diagramm in der Hartree-Fock-Näherung wurde bereits in der Publikation [51] diskutiert. In Abb. 3.11 ist noch der Strom abgebildet, welcher mit der Zeitentwicklung des Dichteoperators berechnet wurde (rote Linie).

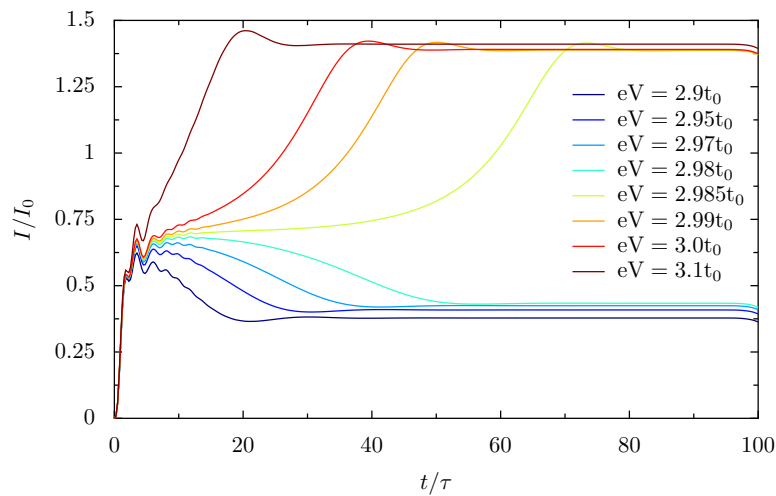


Abbildung 3.12: Stationäre Ströme der Zeitentwicklung des Dichteoperators, aufgetragen auf die Zeit für verschiedene Spannungen. Hier wird der Sprung (im Bereich von $eV = 2.97t_0$ bis $eV = 3.0t_0$) des Zweiplatzmodells mit $U_S = 1.5t_0$ aus Abb. 3.11 näher betrachtet.

Es ist jedoch schwer den stationären Strom in der Umgebung des Sprungs zu bestimmen, da es auch einen Sprung im Graphen des Stroms gibt, welcher gegen die Zeit aufgetragen ist. In Abb. 3.12 wurde der stationäre Strom für verschiedene Spannungen im Bereich $eV = 2.9t_0$ bis $eV = 3.1t_0$ geplottet. Man kann erkennen, dass der Sprung sich im Bereich von $eV = 2.97t_0$ bis $eV = 3.0t_0$ „hinzieht“ und der stationäre Strom in diesem Bereich nicht präzise bestimmt werden kann.

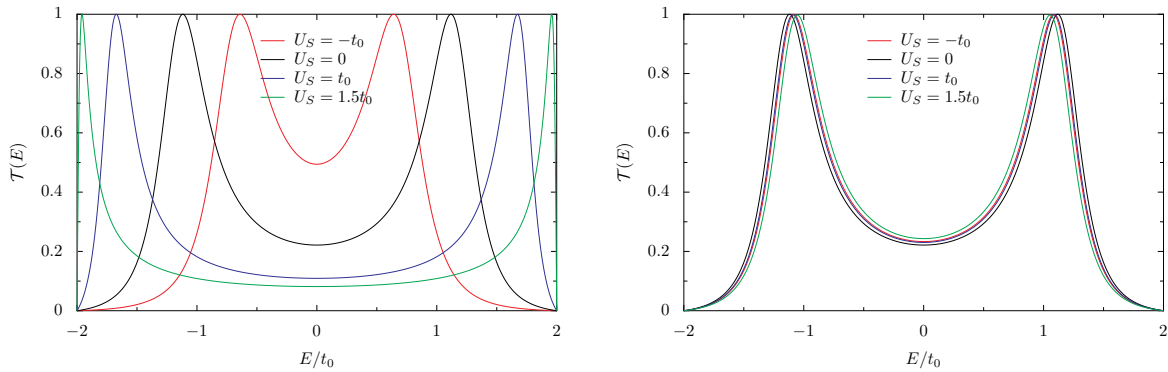


Abbildung 3.13: Transmissionen des Zweiplatzmodells für verschiedene Wechselwirkungen U_S bei einer Spannung $eV = 0$ (links) und $eV = 4t_0$ (rechts) und der inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 8/t_0$. Zudem wurden die Parameter $t' = 0.5t_0$, $t_S = t_0$ und $\varepsilon_S = 0$ verwendet.

Als letztes betrachten wir in diesem Abschnitt die Transmissionen des Zweiplatzmodells (s. Abb. 3.6) mit verschiedenen Wechselwirkungen U_S . Die Transmissionen sind in Abb. 3.13 mit den Spannungen $eV = 0$ (links) und $eV = 4t_0$ (rechts) gegeben. Man erkennt, dass die Transmissionen stark von der Spannung abhängen, bei hohen Spannungen für verschiedene Werte von U_S aber nahezu identisch sind. Dies erklärt auch, warum die Ladungsströme im $I(V)$ -Diagramm für hohe Spannungen von der Wechselwirkung U_S nahezu unabhängig sind. Betrachtet man hingegen die Transmissionen für kleine Spannungen, unterscheiden sich diese für unterschiedliche Werte von U_S sehr deutlich. Für abstoßende Wechselwirkungen (positives U_S) liegen die Maxima der Transmission weiter auseinander als beim wechselwirkungsfreien System, bei einer attraktiven Wechselwirkung (negatives U_S) ist dies umgekehrt. Damit ist auch geklärt, warum die Ströme, im Gegensatz zum wechselwirkungsfreien System, für positives U_S bei kleinen Spannungen kleiner und bei negativen U_S größer werden⁸.

Im nächsten Abschnitt betrachten wir das *interacting resonant level model* (IRLM). Hier werden wir die Ladungsströme, bei denen die Wechselwirkung mit der Hartree-Fock-Näherung behandelt wurde mit exakt berechneten Ladungsströmen vergleichen.

⁸ Die Breite der Differenz der Fermi-Verteilungen liegt in der Größenordnung $\sim eV$. Weil $f_L(E) - f_R(E)$ in den Landauer-Büttiker-Formeln mit den Transmissionen multipliziert wird, ist es für die Stärke des Ladungsstroms entscheidend, wie groß die Fläche der Transmission in diesem Bereich ist.

3.4 Hartree-Fock-Näherung im IRLM

Das IRLM ist ein System mit einem Gitterplatz in der Streuregion, wobei die Elektronen zwischen dem Gitterplatz und den Zuleitungen mit U' wechselwirken (s. Abb. 3.14). Hierbei ist der Fall $U' = 2t_0$ sehr interessant, weil dieser analytisch gelöst werden kann [3]. So kann

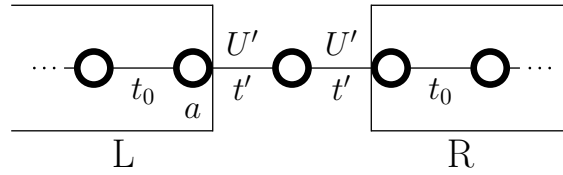


Abbildung 3.14: Aufbau des IRLM, mit einem Gitterplatz in der Streuregion und der Wechselwirkung U' des zentralen Bereichs mit den Zuleitungen.

der Ladungsstrom durch die Streuregion mit

$$I(V) = \frac{e^2 V}{h} {}_3F_2 \left[\left\{ \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 1 \right\}, \left\{ \frac{5}{6}, \frac{7}{6} \right\}, - \left(\frac{V}{V_C} \right)^6 \right] \quad (3.46)$$

angegeben werden [52]. Hier ist ${}_3F_2$ eine hypergeometrische Funktion und $eV_C/t_0 = r(t'/t_0)^{4/3}$ ist mit dem dimensionslosen Vorfaktor $r \approx 3.2$ gegeben. In Abb. 3.15 ist das $I(V)$ -Diagramm

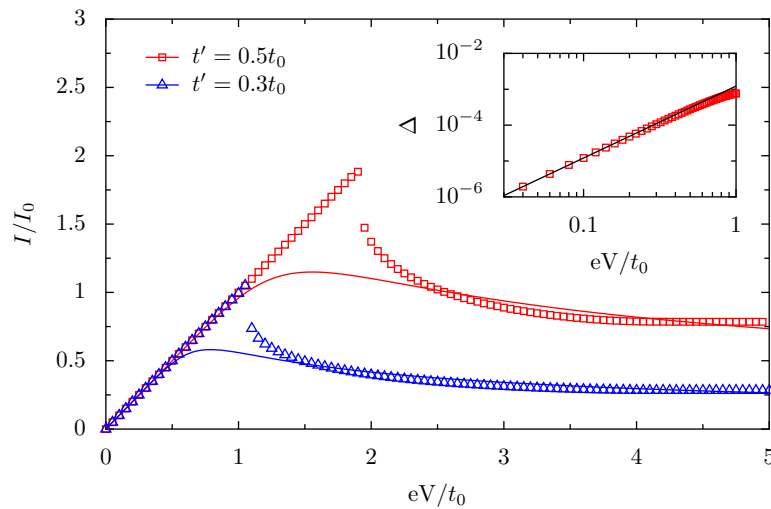


Abbildung 3.15: $I(V)$ -Diagramm des IRLM mit $U' = 2t_0$ und verschiedenen Hoppingparametern $t' = 0.5t_0$ (rot) und $t' = 0.3t_0$ (blau), bei dem die exakte Lösung (Linien) mit der Hartree-Fock-Näherung (Symbole) verglichen wird. Im kleinen Graphen ist die Abweichung des linearen Stroms der Hartree-Fock-Näherung mit $\Delta = 1 - IR_K/V$ auf einer doppelt logarithmischen Skala abgebildet, wobei hier die Symbole die Hartree-Fock-Näherung und die Linie $\Delta \sim V^2$ darstellen.

mit der exakten Lösung des IRLM für eine Wechselwirkung $U' = 2t_0$ abgebildet (Linien) und wird mit der Hartree-Fock-Näherung (Symbole) verglichen. Hier wurden die Hoppingpara-

meter $t' = 0.5t_0$ und $t' = 0.3t_0$ bei einer inversen Temperatur von $\beta_{L,R} = 50/t_0$ verwendet⁹. Berechnet wurden die Ströme mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus in der Hartree-Fock-Näherung.

Man kann erkennen, dass für kleine Spannungen die Ströme der exakten Methode und der Näherung sehr gut übereinstimmen. Das Maximum der Ströme wird von der Hartree-Fock-Näherung überschätzt und es entsteht nach dem linearen Anstieg ein Sprung. Bei hohen Spannungen gibt die Hartree-Fock-Näherung die ungefähren Werte der exakten Lösung wieder. Jedoch sinkt die exakte Lösung bei noch höheren Spannungen weiter ab, wohingegen die Hartree-Fock-Näherung bei hohen Spannungen einen konstanten Wert annimmt.

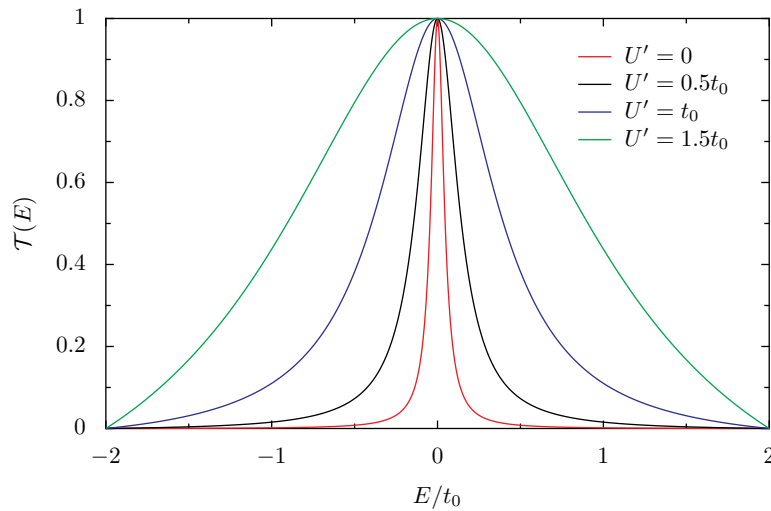


Abbildung 3.16: Mit der Hartree-Fock-Näherung berechnete Transmissionen des IRLM mit verschiedenen U' bei einer Spannung $eV = 0$ und einer inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 50/t_0$. Zudem wurde der Hoppingparameter $t' = 0.15t_0$ gewählt.

Wir betrachten nun den linearen Anstieg bei kleinen Spannungen genauer. Dazu entwickeln wir ${}_3F_2$ in Gl. (3.46) mit einer Taylor-Reihe um kleine Werte von $x = (V/V_C)^6$ und erhalten für die ersten zwei Terme [53]

$${}_3F_2[\{a_1, a_2, a_3\}, \{b_1, b_2\}, -x] = 1 - \frac{a_1 a_2 a_3}{b_1 b_2} x + \mathcal{O}(x^2) \quad (3.47)$$

und damit den Strom

$$I(V) \approx \frac{V}{R_K} \left[1 - \frac{27}{140} \left(\frac{V}{V_C} \right)^6 \right], \quad (3.48)$$

wobei wir hier die Von-Klitzing-Konstante $R_K = h/e^2$ eingeführt haben. Hier kann man den linearen Anstieg bei kleinen Spannungen, aber auch eine Abweichung $\Delta = 1 - IR_K/V \sim$

⁹ Hier wurden tiefe Temperaturen gewählt, da Gl. (3.46) für $T = 0$ gilt.

$(V/V_C)^6$ in nächster Ordnung der Spannung erkennen. Wenn die Hartree-Fock-Näherung den Strom exakt wiedergibt, müsste auch hier eine Abweichung von $\Delta \sim (V/V_C)^6$ zu sehen sein.

Dazu trägt man nun Δ auf die Spannung in einem doppelt logarithmischen Diagramm auf und liest die Potenz des Stroms durch die Steigung ab. Dies ist in Abb. 3.15 im kleinen Graphen geplottet und man kann erkennen, dass $\Delta \sim V^2$ gilt. Also gibt die Hartree-Fock-Näherung den linearen Anstieg des Stroms nur bedingt wieder. Jedoch kann man aus den Publikationen [54, 55] entnehmen, dass das Verhalten $\Delta \sim V^2$ auch beim IRLM für Wechselwirkungen $U' \neq 2t_0$ vorkommt.

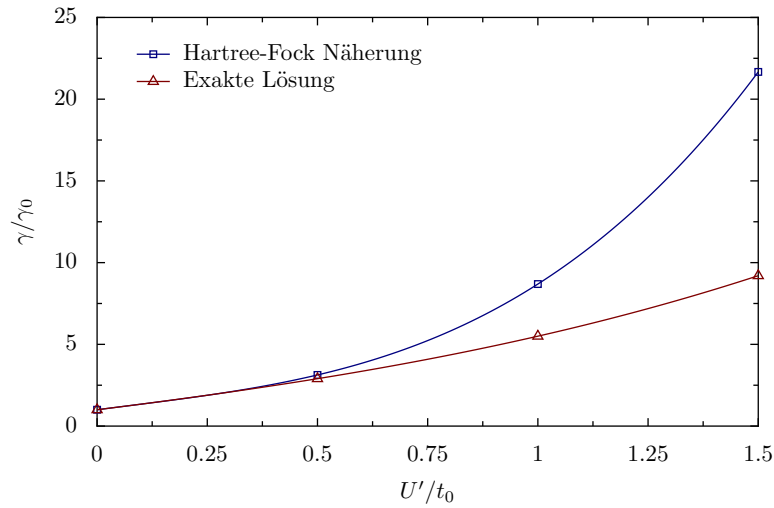


Abbildung 3.17: Die Breite γ/γ_0 der Lorentz-Verteilung aus Abb. 3.16, verglichen mit der exakten Lösung aus der Publikation [56], aufgetragen auf U' . Hierbei ist $\gamma_0 = 2t'^2/t_0$ die Breite der Lorentz-Verteilung des IRLM bei $U' = 0$.

In Abb. 3.16 kann man die Transmissionen, berechnet mit der Hartree-Fock-Näherung, für verschiedene Werte von U' bei einer Spannung von $eV = 0$ und einer inversen Temperatur $\beta_{L,R} = 50/t_0$ vergleichen, wobei hier der Hoppingparameter $t' = 0.15t_0$ gewählt wurde. Man kann erkennen, dass die Kurven bei steigenden Wechselwirkungen breiter werden. Die Breite γ der Kurven kann bestimmt werden, indem bei kleinen Werten um $E = 0$ die Funktionen der Transmissionen durch die Lorentz-Verteilung

$$\mathcal{T}(E) \approx \frac{1}{1 + \frac{E^2}{\gamma^2}} \quad (3.49)$$

gefittet wird. Im IRLM bei $U' = 0$ haben wir in Kapitel 2 bereits herausgefunden, dass $\gamma_0 = 2t'^2/t_0$ für $t_0 \gg t'$ gilt (Gl. (2.65)). Nun vergleichen wir in Abb. 3.17 die Breiten der Lorentz-Verteilungen γ/γ_0 aus Abb. 3.16 mit der exakten Breite, berechnet von Braun *et al.* [56]. Man kann erkennen, dass bei kleinen Wechselwirkungen U' die Werte noch gut übereinstimmen,

bei größeren Werten von U' die Hartree-Fock-Näherung die Breite der Lorentz-Verteilungen aber überschätzt.

3.5 Wechselwirkung zwischen Elektronen auf einem Gitterplatz

Im diesem Abschnitt betrachten wir nun die Wechselwirkung U_G zwischen zwei Elektronen mit verschiedenem Spin auf einem Gitterplatz in der Hartree-Fock-Näherung. Der zugehörige Hamiltonoperator¹⁰ des Systems ist dann

$$\hat{H}_{\text{ges}, U_G} = \hat{H}_{L,s} + \hat{H}_{LS,s} + \hat{H}_{S,s} + \hat{H}_{SR,s} + \hat{H}_{R,s}, \quad (3.50)$$

wobei hier die Zuleitungen mit

$$\hat{H}_{L,s} = -t_0 \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^a \left(\hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (3.51)$$

$$\hat{H}_{R,s} = -t_0 \sum_{\sigma} \sum_{j=b}^{N_{\text{ges}}} \left(\hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (3.52)$$

gegeben sind. Zudem sind die Ankopplungen der Zuleitungen an den zentralen Gitterplatz

$$\hat{H}_{LS,s} + \hat{H}_{SR,s} = -t' \sum_{\sigma} \left(\hat{c}_{a,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{a+1,\sigma} + \hat{c}_{b-1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{b,\sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (3.53)$$

und der Hamiltonoperator des Gitterplatzes hat die Form

$$\hat{H}_{S,s} = \varepsilon_S \hat{n}_{a+1,\uparrow} + \varepsilon_S \hat{n}_{a+1,\downarrow} + U_G \left(\hat{n}_{a+1,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{a+1,\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (3.54)$$

Hier wird über die beiden Spinrichtungen $\sigma = \uparrow, \downarrow$ summiert. Zusätzlich nehmen wir für die Zuleitungen $\varepsilon_{L,R} = 0$ und $t_{L,R} = t_0$ an. In einem wechselwirkungsfreien System bewirken die Spins, dass die Ströme durch die Streuregion doppelt so groß sind, da wir keine externen Felder oder Gitterstrukturen betrachten, welche eine Spinrichtung bevorzugen würden. So kann man im wechselwirkungsfreien Fall einfach von zwei separaten Spinkanälen sprechen, welche identisch aufgebaut sind.

Da die Zuleitungen nach wie vor wechselwirkungsfrei sind, interagieren die Elektronen mit verschiedenem Spin lediglich auf dem Gitterplatz im zentralen Bereich, weshalb wir das System auch wie in Abb. 3.18 betrachten können. Hier sind die Zuleitungen durch zwei

¹⁰ Der Index s weist nun auf die Spinabhängigkeit der Hamiltonoperatoren hin.

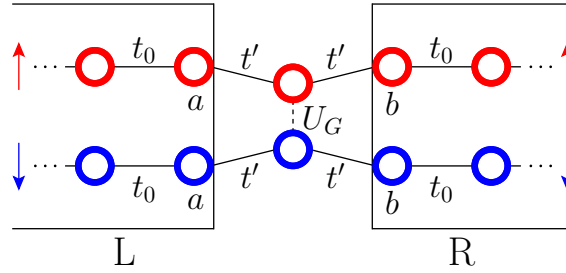


Abbildung 3.18: Schematische Darstellung eines eindimensionalen Systems mit einem Gitterplatz in der Streuregion, auf dem Elektronen mit verschiedenem Spin mit U_G wechselwirken können. Die verschiedenen Spinkanäle wurden in dieser Skizze separat gezeichnet, die übereinanderliegenden Gitterplätze besitzen allerdings die gleichen Ortskoordinaten.

verschiedene Kanäle (Spinrichtung nach oben und nach unten) abgebildet, wobei die übereinander liegenden Gitterplätze die gleichen Ortskoordinaten besitzen und auf dem zentralen Gitterplatz Elektronen mit verschiedenem Spin mit U_G wechselwirken können. Nähert man nun den wechselwirkenden Term mit der Hartree-Fock-Näherung, kann man erkennen, dass der Fock-Term (Hopping-Term) nicht vorkommt, da sonst beispielsweise Elektronen mit Spin \uparrow in den Kanal der Elektronen \downarrow wechseln könnten. Deshalb betrachten wir lediglich den Hartree-Term und erhalten

$$\hat{H}_{S, \text{HF}, s} = \varepsilon_S \hat{n}_{a+1, \uparrow} + \varepsilon_S \hat{n}_{a+1, \downarrow} + U_G \left(\langle \hat{n}_{a+1, \uparrow} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{a+1, \downarrow} + U_G \left(\langle \hat{n}_{a+1, \downarrow} \rangle - \frac{1}{2} \right) \hat{n}_{a+1, \uparrow}. \quad (3.55)$$

Weil die beiden Spinkanäle identisch aufgebaut sind, muss für den Erwartungswert des zentralen Gitterplatzes $\langle \hat{n}_{a+1, \downarrow} \rangle = \langle \hat{n}_{a+1, \uparrow} \rangle$ gelten. So können wir bei der Berechnung des Ladungs- und Energiestroms durch die Streuregion das System mit spinlosen Elektronen annehmen und den zentralen Gitterplatz formal mit sich selbst wechselwirken lassen. Die Ströme werden anschließend mit einem Faktor zwei multipliziert.

Die Hartree-Fock-Näherung darf allerdings nur bei kleinen Werten der Wechselwirkung U_G (im Vergleich zur Energiebandbreite der Zuleitungen) angewendet werden. Im Grenzfall zur Behandlung von starken Wechselwirkungen können Coulomb-Blockade-Effekte erwartet werden. Bei dieser wird die Wechselwirkung der Elektronen mit verschiedenem Spin auf einem Quantenpunkt als ein System mit zwei verschiedenen Energieniveaus beschrieben [57]. Das in diesem Abschnitt betrachtete System wird auch als *single-impurity Anderson model* (SIAM) bezeichnet. Hier können die Ladungsströme durch die Streuregion auch numerisch ohne Näherung bestimmt werden, was aber mit sehr großen Rechenzeiten verbunden ist [10]. Auch der Kondo-Effekt, bei dem der Widerstand bei sinkenden Temperaturen ansteigt, kann mit dem SIAM beobachtet werden [57, 58].

In diesem Kapitel haben wir uns ausführlich mit der Hartree-Fock-Näherung in einem eindimensionalen Tight-Binding-Modell im Nichtgleichgewicht bezüglich der Spannung und der

Temperatur auseinandergesetzt. Durch Vergleiche mit exakten Lösungen von wechselwirkenden Systemen haben wir herausgefunden, dass die Hartree-Fock-Näherung in vielen Bereichen die Ladungsströme durch die Streuregion qualitativ korrekt wiedergibt. Zudem bietet die Hartree-Fock-Näherung eine zeitsparende Möglichkeit, um das Verhalten von Ladungsströmen in wechselwirkenden Systemen abschätzen zu können, da die exakte numerische Lösung solcher Systeme mit sehr großen Rechenzeiten verbunden ist. Allerdings fanden wir heraus, dass bei großen Spannungen oder großen Werten von U' oder U_S die Ladungsströme, welche mit der Hartree-Fock-Näherung berechnet wurden, nicht mehr mit den exakt berechneten Ladungsströmen übereinstimmen.

4 Thermoelemente und lineare Transportkoeffizienten

Bisher wurden die Grundlagen von eindimensionalen Tight-Binding-Modellen diskutiert und wie die Wechselwirkung zwischen Elektronen in der Streuregion behandelt werden kann. Diese Grundlagen werden wir für den Rest der Arbeit verwenden, um die Nanowärmemaschine beschreiben zu können. Die Nanowärmemaschine funktioniert auf der Basis des Seebeck-Effekts, bei dem aus einer Temperaturdifferenz zwischen den Zuleitungen eine Spannung erzeugt wird. In diesem Kapitel werden wir uns daher näher mit der Funktionsweise von Thermoelementen befassen und uns mit dem Seebeck-Effekt auseinandersetzen. Der umgekehrte Effekt, auf den wir auch kurz eingehen werden, ist der Peltier-Effekt, bei dem beim Anlegen einer Spannung ein Bereich eines Thermoelements abgekühlt wird. Des Weiteren werden wir die Landauer-Büttiker-Formeln für den Ladungs- und den Wärmestrom linearisieren, um mit den daraus resultierenden Transportkoeffizienten Größen wie den thermischen und elektrischen Leitwert oder den Seebeck-Koeffizienten bestimmen zu können¹.

4.1 Peltier- und Seebeck-Effekt

Thermoelemente werden verwendet, um entweder einen Ladungsstrom aus einer Temperaturdifferenz zu erzeugen, oder umgekehrt, einen Bereich mit Hilfe einer angelegten Spannung zu kühlen. Dazu werden, anders als bei elektrischen Generatoren und Kompressionskältemaschinen², keine mechanisch bewegbaren Teile oder Flüssigkeiten benötigt.

In Abbildung 4.1 ist der schematische Aufbau eines Seebeck-Elements dargestellt, bei dem zwei verschiedene leitfähige Materialien verbunden werden. Legt man an den Verbindungen

¹ Die Grundlagen zu den Thermoelementen und den linearen Transportkoeffizienten in diesem Kapitel wurden hauptsächlich in den Arbeiten [62,65] recherchiert, die Ergebnisse am Ende des Kapitels beruhen zum Teil auf der Referenz [34].

² Wird in handelsüblichen Kühlschränken verwendet.

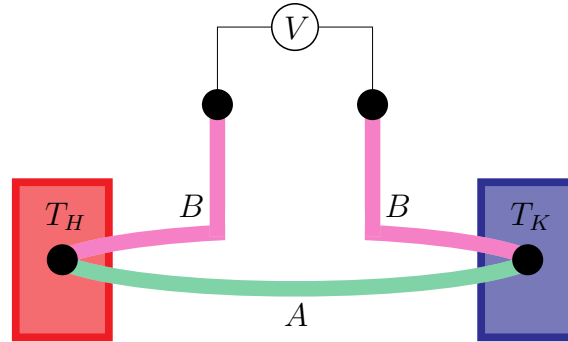


Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau eines Seebeck-Elements, bei dem die Verbindungen der Materialien A und B mit verschiedenen Temperaturen einen Spannungsunterschied der oberen beiden Punkte zur Folge hat.

der Materialien A und B verschiedene Temperaturen an, so kann an den oberen Knoten eine Spannung gemessen werden. Diese Spannung lässt sich mit

$$V = \int_{T_K}^{T_H} (\mathcal{S}_A(T) - \mathcal{S}_B(T)) dT \quad (4.1)$$

berechnen [59], wobei $\mathcal{S}_A(T)$ und $\mathcal{S}_B(T)$ die materialspezifischen Seebeck-Koeffizienten von A und B darstellen, welche im Allgemeinen temperaturabhängig sind. Für kleine Temperaturunterschiede und konstante Seebeck-Koeffizienten lässt sich die Formel zu

$$V = (\mathcal{S}_A - \mathcal{S}_B)(T_H - T_K) \quad (4.2)$$

vereinfachen. Hier kann man leicht erkennen, dass die Spannung höher wird, je größer die Differenz zwischen den Seebeck-Koeffizienten ist.

Wenn beim Seebeck-Element eine Spannung an den oberen Knoten angelegt wird, wird dies als Peltier-Element bezeichnet (Abb. 4.2). Um den Schaltkreis mit den Materialien A und B bei konstanter Temperatur halten zu können, muss an einer Verbindungsstelle der Materialien Wärme hinzu und an der anderen Verbindung Wärme abgeführt werden, was in der Abbildung mit den Pfeilen (Wärmeströme) verdeutlicht werden soll.

Fließt ein Ladungsstrom I durch die Verbindungsstelle von Material A nach B kann der resultierende Wärmestrom mit

$$J^W = (\Pi_A - \Pi_B)I \quad (4.3)$$

angegeben werden [60], wobei Π_A und Π_B die Peltier-Koeffizienten darstellen. Auch diese sind Materialkonstanten, die im Allgemeinen temperaturabhängig sind.

Auch wenn sowohl der Seebeck-, als auch der Peltier-Effekt bereits in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts entdeckt wurden, konnten sich die Thermoelemente - bis auf wenige Fälle - nicht wirklich durchsetzen. Dieser Umstand ist dem schlechten Wirkungsgrad

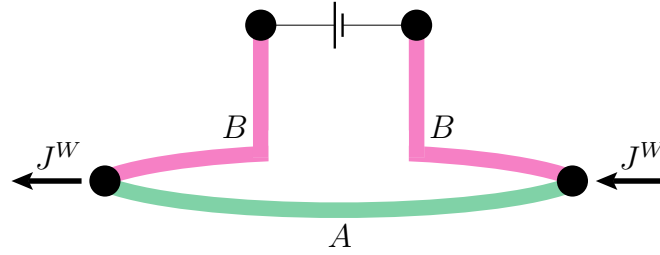


Abbildung 4.2: Aufbau eines Peltier-Elements. Wird bei den oberen Knoten eine Spannung angelegt, muss bei einer Verbindungsstelle der Materialien A und B Wärme hinzu, bei der anderen Wärme abgeführt werden, um den Schaltkreis bei konstanter Temperatur halten zu können.

von 3-8% dieser Elemente geschuldet [59]. Bei diesen Werten wurden bereits Halbmetalle wie Bleitellurid (PbTe) und Bismuttellurid (Bi_2Te_3) für die Materialien A und B verwendet [61], da diese den Wirkungsgrad im Vergleich zu Metallen erheblich verbessern können.

In dieser Arbeit werden wir uns, besonders in Kapitel 5, auf den Seebeck-Effekt beschränken. Größen wie der Seebeck-Koeffizient, aber auch der thermische oder elektrische Leitwert, lassen sich leicht durch Transportkoeffizienten darstellen, wenn man Systeme bei kleinen Temperaturdifferenzen und kleinen Spannungen betrachtet. Diese Transportkoeffizienten lassen sich aus den linearisierten Landauer-Büttiker-Formeln bestimmen, was wir im nächsten Abschnitt diskutieren werden.

4.2 Lineare Transportkoeffizienten

Wir betrachten zunächst ein Gesamtsystem, welches in zwei Systeme L und R unterteilt ist (s. Abb. 4.3). Die Systeme L und R sollen schwach gekoppelt sein und die Entropien S_L und S_R besitzen, welche im Allgemeinen von den extensiven Größen X_L und X_R abhängen. X_i steht für Größen wie die innere Energie E_i , die Teilchenzahl N_i oder das Volumen V_i , wobei $i = L, R$. Da das gesamte System abgeschlossen ist, bleibt die extensive Größe des gesamten Systems $X_{\text{ges}} = X_L + X_R$ konstant.

Die Entropien der Untersysteme und die zugehörigen extensiven Größen können nun verwendet werden, um die Affinität [62]

$$\mathcal{F}_X = \frac{\partial S_L}{\partial X_L} - \frac{\partial S_R}{\partial X_R} = F_{X_L} - F_{X_R} \quad (4.4)$$

zu berechnen, welche sich aus den generalisierten Kräften F_{X_L} und F_{X_R} zusammensetzt. Wenn die Affinität verschwindet ($\mathcal{F}_X = 0$), befindet sich das gesamte System im Gleichgewicht. Ist jedoch $\mathcal{F}_X \neq 0$, so findet ein irreversibler Prozess zwischen den Systemen L und R statt,

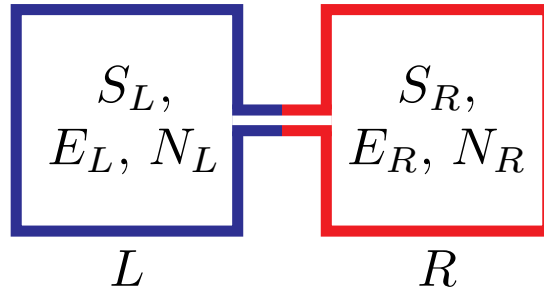


Abbildung 4.3: System, bestehend aus zwei Untersystemen, mit den Entropien S_L und S_R . Die Entropien hängen von den extensiven Größen E_i (innere Energie) und N_i (Teilchenzahl) mit $i = L, R$ ab.

bis sich das gesamte System wieder im Gleichgewicht befindet. Während des Prozesses können die Ströme J^X zwischen den Systemen L und R gemessen werden, welche durch die extensiven Größen X_i verursacht werden. Die Ströme sind also durch die zeitliche Änderung der extensiven Größen wie folgt definiert:

$$J^X = -\frac{dX_L}{dt} = \frac{dX_R}{dt}. \quad (4.5)$$

Hier ist der Strom von links nach rechts wieder die positive Stromrichtung. Die zeitliche Änderung der Entropie des gesamten Systems [62] kann mit

$$\frac{dS_{\text{ges}}}{dt} = -\sum_X \left(\frac{\partial S_L}{\partial X_L} \frac{dX_L}{dt} + \frac{\partial S_R}{\partial X_R} \frac{dX_R}{dt} \right) \quad (4.6)$$

berechnet werden, wobei hier über die extensiven Größen $X = E, N, \dots$ summiert wird. Verwenden wir die Definitionen der Ströme und der Affinität aus Gl. (4.4) und (4.5), vereinfacht sich die zeitliche Änderung der Entropie zu

$$\dot{S}_{\text{ges}} = \sum_X \mathcal{F}_X J^X. \quad (4.7)$$

Bisher haben wir die extensiven Größen allgemein gehalten. Wie bereits in Abb. 4.3 zu sehen ist, werden wir diese im weiteren Verlauf auf die inneren Energien E_i und die Teilchenzahlen N_i der Untersysteme beschränken. Die zugehörigen Ströme sind dann der Teilchenstrom I^N und der Energiestrom J^E .

Aus der Bedingung, dass die gesamten extensiven Größen, also die Energie $E_{\text{ges}} = E_L + E_R$ und die Teilchenzahl $N_{\text{ges}} = N_L + N_R$ konstant sind, folgt unmittelbar, dass für die totalen Differentiale $dE_L = -dE_R$ und $dN_L = -dN_R$ gilt. Mit diesen Bedingungen lassen sich nun für die generalisierten Kräfte folgende Relationen mit Hilfe des ersten Hauptsatzes der

Thermodynamik herleiten [63]:

$$F_{U_L} = \left(\frac{\partial S_L}{\partial E_L} \right)_{N_L} = \frac{1}{T_L} \quad (4.8)$$

$$F_{N_L} = \left(\frac{\partial S_L}{\partial N_L} \right)_{E_L} = -\frac{\mu_L}{T_L}, \quad (4.9)$$

wobei bei der partiellen Ableitung in Gl. (4.8) die Teilchenzahl N_L und in Gl. (4.9) die Energie E_L konstant gehalten wird. Des Weiteren ist μ_L hier wieder das chemische Potential und die generalisierten Kräfte für das Untersystem R sind durch $F_{U_R} = -F_{U_L}$ und $F_{N_R} = -F_{N_L}$ gegeben. Die Affinitäten sind dann:

$$\mathcal{F}_U = \frac{1}{T_L} - \frac{1}{T_R} = \Delta \left(\frac{1}{T} \right) \quad (4.10)$$

$$\mathcal{F}_N = -\frac{\mu_L}{T_L} + \frac{\mu_R}{T_R} = -\Delta \left(\frac{\mu}{T} \right). \quad (4.11)$$

Damit erhalten wir für die zeitliche Ableitung der Entropie den Ausdruck

$$\dot{S} = -\Delta \left(\frac{\mu}{T} \right) I^N + \Delta \left(\frac{1}{T} \right) J^E. \quad (4.12)$$

Für kleine Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_L - T_R$ und kleine Spannungen $eV = \Delta\mu = \mu_L - \mu_R$ lässt sich der Zusammenhang zwischen den Strömen und den Affinitäten durch ein lineares Gleichungssystem mit den Transportkoeffizienten L'_{ij} wie folgt ausdrücken

$$\begin{pmatrix} I^N \\ J^E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L'_{11} & L'_{12} \\ L'_{21} & L'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Delta \left(\frac{\mu}{T} \right) \\ \Delta \left(\frac{1}{T} \right) \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Hier sind die Onsager-Relationen mit $L'_{12} = L'_{21}$ erfüllt [62]. Als nächsten Schritt drücken wir die Ströme durch $\Delta\mu$ und ΔT aus und erhalten

$$\begin{pmatrix} I^N \\ J^E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -L'_{11} & \mu_S L'_{11} - L'_{12} \\ -L'_{21} & \mu_S L'_{21} - L'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\Delta\mu}{T} \\ \frac{\Delta T}{T^2} \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

wobei hier Terme höherer Ordnung wie $(\Delta T)^2$ und $(\Delta\mu)^2$ vernachlässigt wurden, da wir kleine Temperaturdifferenzen und Spannungen annehmen. An dieser Stelle sollte noch erwähnt werden, dass die positive Stromrichtung wieder von links nach rechts geht und damit die Transportkoeffizienten $L'_{ij} < 0$ sind. Des Weiteren ist μ_S das chemische Potential der Streuregion, welches wir bereits in Abschnitt 2.3.1 mit $\mu_S = (\mu_L + \mu_R)/2$ definiert hatten.

Da wir bisher immer den Ladungsstrom (statt des Teilchenstroms) behandelt haben, schrei-

ben wir auch hier den Teilchenstrom mit $I = eI^N$ um, wobei wieder die negative Elementarladung $e < 0$ verwendet wird. Des Weiteren sind die Onsager-Relationen in Gl. (4.16) lediglich für $\mu_S = 0$ erfüllt, weswegen $L'_{12} = L'_{21}$ im Allgemeinen nicht mehr gilt. Deshalb betrachten wir statt des Energiestroms den Wärmestrom mit $J^W = J^E - \mu_S I^N$ und erhalten

$$\begin{pmatrix} I \\ J^W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^2 L'_{11} & e(\mu_S L'_{11} - L'_{12}) \\ e(\mu_S L'_{11} - L'_{21}) & -\mu_S^2 L'_{11} + \mu_S(L'_{12} + L'_{21}) - L'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\Delta\mu}{eT} \\ \frac{\Delta T}{T^2} \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

wobei hier die Onsager-Relationen wieder erfüllt sind.

Nun führen wir „neue“ lineare Transportkoeffizienten ein und erhalten

$$\begin{pmatrix} I \\ J^W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\Delta\mu}{eT} \\ \frac{\Delta T}{T} \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

wobei $L_{12} = L_{21}$ und $L_{ij} > 0$ gilt. Mit den Koeffizienten L_{ij} können nun wichtige thermoelektrische Größen wie der elektrische Leitwert³

$$G = \left(\frac{I}{V} \right)_{\Delta T=0} = L_{11} \quad (4.17)$$

der thermische Leitwert

$$\Xi = \left(\frac{J^W}{\Delta T} \right)_{I=0} = \frac{1}{T} \frac{L_{11}L_{22} - L_{12}L_{21}}{L_{11}} \quad (4.18)$$

oder der Seebeck-Koeffizient der Streuregion

$$S = - \left(\frac{V}{\Delta T} \right)_{I=0} = \frac{1}{T} \frac{L_{12}}{L_{11}} \quad (4.19)$$

bestimmt werden [65].

Im nächsten Abschnitt werden wir die Leitwerte G und Ξ benutzen, um das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\Xi}{G} = T \cdot \text{konst.} \quad (4.20)$$

für $T \rightarrow 0$ nachzuweisen.

³ Der elektrische Leitwert G ist der Kehrwert des ohmschen Widerstandes und hängt mit der elektrischen Leitfähigkeit σ wie folgt zusammen: $G = \sigma A/l$, wobei A die Querschnittsfläche und l die Länge des Leiters darstellen [64]. Analog hängen auch der thermische Leitwert und die thermische Leitfähigkeit zusammen.

4.3 Sommerfeld-Entwicklung der Landauer-Büttiker-Formeln

Die Transportkoeffizienten L_{ij} können aus den linearisierten Landauer-Büttiker-Formeln abgelesen werden, weswegen wir in diesem Abschnitt beim Ladungsstrom

$$I = \frac{e}{h} \int dE \mathcal{T}(E) (f_L(E) - f_R(E)) \quad (4.21)$$

und beim Wärmestrom

$$J^W = \frac{1}{h} \int dE (E - \mu_S) \mathcal{T}(E) (f_L(E) - f_R(E)) \quad (4.22)$$

die Sommerfeld-Entwicklung [60] durchführen werden. Wie im letzten Abschnitt ist die Linearisierung der Ströme nur bei kleinen Spannungen $eV = \mu_L - \mu_R$ und kleinen Temperaturdifferenzen $\Delta T = T_1 - T_2$ gültig. Deshalb können die Fermi-Verteilungen

$$f_{L,R}(E) = \left[e^{\frac{1}{T \pm \frac{\Delta T}{2}} (E - (\mu_S \pm \frac{\Delta \mu}{2}))} + 1 \right]^{-1} \quad (4.23)$$

um die Temperatur T und das chemische Potential μ_S wie folgt entwickelt werden:

$$f(\alpha \pm \Delta\alpha/2) \approx f(\alpha) \pm \frac{\Delta\alpha}{2} \frac{df(\alpha)}{d\alpha}. \quad (4.24)$$

Damit erhält man für die linearisierten Fermi-Verteilungen

$$f_{L,R}(x) \approx f_0(x) - \frac{df_0(x)}{dx} \left[\frac{1}{2k_B T} (\pm \Delta\mu) + \frac{x}{2T} (\pm \Delta T) \right], \quad (4.25)$$

wobei $x = (E - \mu_S)/k_B T$ und $f(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}$ ist. Die Differenz der Fermi-Verteilungen ist dann gegeben durch

$$f_L(x) - f_R(x) = -\frac{df_0(x)}{dx} \left(\frac{1}{k_B T} \Delta\mu + \frac{x}{T} \Delta T \right). \quad (4.26)$$

In Abb. 4.4 ist die Ableitung der Fermi-Verteilung $df_0(x)/dx$ in Abhängigkeit der Energie abgebildet. Die Energie ist hier in Einheiten der Temperatur mit $E/k_B T$ gegeben und es wurde für das chemische Potential $\mu_S = -k_B T$ gewählt. Man erkennt, dass das Maximum der Funktion bei μ_S liegt und zudem die Breite der Funktion in etwa $\sim k_B T$ beträgt. Für kleine Temperaturen wird die Ableitung der Fermi-Verteilung $f_0(x)$ also sehr scharf um μ_S verteilt. Deshalb entwickeln wir die Transmission mit Hilfe der Taylor-Reihe um das chemische

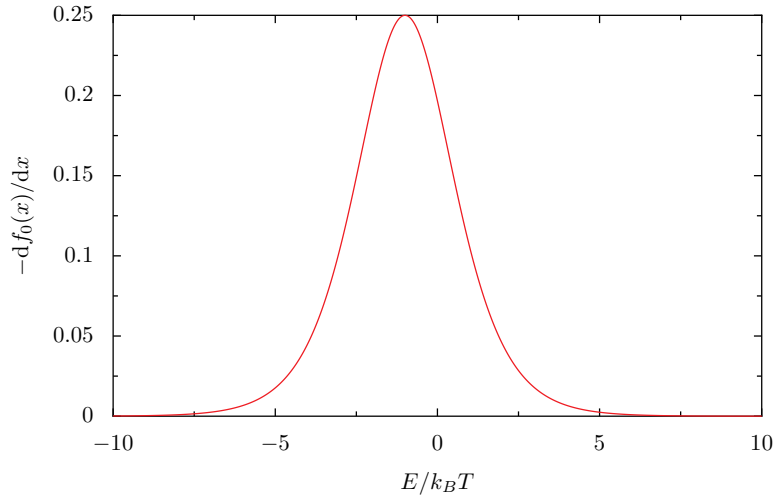


Abbildung 4.4: Ableitung der Fermi-Verteilung $f_0(x)$, aufgetragen auf die Energie $E/k_B T$ mit $\mu_S = -k_B T$.

Potential μ_S und erhalten damit

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n \mathcal{T}(E)}{dE^n} \right|_{E=\mu_S} (E - \mu_S)^n. \quad (4.27)$$

Der besseren Übersicht halber schreiben wir die n -te Ableitung der Transmission an der Stelle μ_S ab jetzt in der Form $\mathcal{T}^{(n)}(\mu_S)$.

Für kleine Temperaturdifferenzen und Spannungen kann der Ladungsstrom (Landauer-Büttiker-Formel) nun bei kleinen Temperaturen durch

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{T}^{(n)}(\mu_S)}{n!} (E - \mu_S)^n \right] \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) \left(\frac{1}{k_B T} \Delta\mu + \frac{x}{T} \Delta T \right) \\ &= \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{T}^{(n)}(\mu_S)}{n!} (k_B T x)^n \right] \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) (\Delta\mu + x k_B \Delta T) \end{aligned} \quad (4.28)$$

ausgedrückt werden, wobei hier zweimal mit $E' = E - \mu_S$ und $x = E'/k_B T$ substituiert wurde.

Bisher haben wir bei den Landauer-Büttiker-Formeln über alle Energien des Energiebands $E_{L,R} = -2t_0 \cos k$ der Zuleitungen mit $-2t_0 < E_{L,R} < 2t_0$ integriert. Da wir das System bei kleinen Temperaturen betrachten, gilt $t_0 \gg k_B T$. Wie wir in Abb. 4.4 bereits festgestellt hatten, ist die Ableitung der Fermi-Verteilung dann sehr scharf, weswegen wir nun von $-\infty$ bis ∞ integrieren.

Analog zum Ladungsstrom erhalten wir für den Wärmestrom

$$\begin{aligned}
 J^W &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{T}^{(n)}(\mu_S)}{n!} (E - \mu_S)^{n+1} \right] \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) \left(\frac{1}{k_B T} \Delta\mu + \frac{x}{T} \Delta T \right) \\
 &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{T}^{(n)}(\mu_S)}{n!} (k_B T x)^{n+1} \right] \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) (\Delta\mu + x k_B \Delta T) .
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

4.4 Das Wiedemann-Franz-Gesetz

Mitte des 19. Jahrhunderts betrachteten Gustav Wiedemann und Rudolph Franz verschiedene Metalle bei kleinen Temperaturen. Dabei fanden sie heraus, dass der Quotient aus dem thermischen Leitwert und dem elektrischen Leitwert bei gleichen Temperaturen für verschiedene Metalle konstant ist. Dieses Verhalten kennt man als Wiedemann-Franz-Gesetz [65]

$$\frac{\Xi}{G} = \mathcal{L}_0 T, \tag{4.30}$$

welches für $T \rightarrow 0$ ein lineares Verhalten in der Temperatur zeigt. Die Lorenz-Zahl ist bei wechselwirkungsfreien Systemen

$$\mathcal{L}_0 = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 . \tag{4.31}$$

Das Wiedemann-Franz-Gesetz kann aus den Landauer-Büttiker-Formeln (Ladungs- und Wärmestrom) hergeleitet werden, was wir nun im Folgenden nachweisen werden.

Das Ziel ist, die linearen Transportkoeffizienten L_{ij} aus Abschnitt 4.2 zu verwenden, um den elektrischen und thermischen Leitwert (s. Gl. (4.17) und (4.18)) zu berechnen. Die Transportkoeffizienten lassen sich leicht aus den Landauer-Büttiker-Formeln ablesen, da wir bereits in Gl. (4.28) und Gl. (4.29) die $\Delta\mu$ und ΔT abhängigen Terme voneinander getrennt hatten.

Wir verwenden nun den Ladungsstrom

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) \left[\mathcal{T}(\mu_S) \Delta\mu + k_B T \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) x^2 k_B \Delta T \right], \tag{4.32}$$

wobei hier, wegen der Annahme $T \rightarrow 0$, lediglich die ersten beiden Entwicklungsterme der Transmission verwendet wurden. Da die Ableitung der Fermi-Verteilung $f_0(x)$ eine symmetrische Funktion in x darstellt, fallen alle Terme der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) = 0 \tag{4.33}$$

für ungerade n heraus. In Gl. (4.32) müssen zwei Integrale ausgewertet werden. Zum einen das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) = \left[-\frac{1}{e^x + 1} \right]_{-\infty}^{\infty} = 1, \quad (4.34)$$

welches trivial zu lösen ist, da über die gleiche Variable integriert und differenziert wird. Zum anderen das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) = 2\zeta(2) = \frac{\pi^2}{3}, \quad (4.35)$$

dessen Lösung die Zeta-Funktion mit $\zeta(2) = \pi^2/6$ ist [66]. Damit erhält man für den Ladungsstrom

$$I = \frac{e}{h} \mathcal{T}(\mu_S) \Delta\mu + \frac{e\pi^2}{3h} k_B T \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) k_B \Delta T. \quad (4.36)$$

Der Wärmestrom lässt sich, analog zum Ladungsstrom, wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} J^W &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{df_0(x)}{dx} \right) \left[(k_B T)^2 \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) x^2 \Delta\mu + k_B T \mathcal{T}(\mu_S) x^2 k_B \Delta T \right] \\ &= \frac{\pi^2}{3h} (k_B T)^2 \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) \Delta\mu + \frac{\pi^2}{3h} k_B T \mathcal{T}(\mu_S) k_B \Delta T \end{aligned} \quad (4.37)$$

Aus den Ausdrücken für den Ladungs- und den Wärmestrom können die linearen Transportkoeffizienten direkt aus dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I \\ J^W \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{e^2}{h} \mathcal{T}(\mu_S) & \frac{e\pi^2}{3h} (k_B T)^2 \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) \\ \frac{e\pi^2}{3h} (k_B T)^2 \mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) & \frac{\pi^2}{3h} (k_B T)^2 \mathcal{T}(\mu_S) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\Delta\mu}{e} \\ \frac{\Delta T}{T} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\Delta\mu}{e} \\ \frac{\Delta T}{T} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.38)$$

abgelesen werden, wobei hier die Onsager-Relationen $L_{12} = L_{21}$ bestätigt werden. Nun berechnen wir den Quotienten des thermischen und des elektrischen Leitwerts mit Hilfe der Gleichungen (4.17) und (4.18) und erhalten das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\Xi}{G} = \frac{L_{22}}{T L_{11}} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} T = \mathcal{L}_0 T. \quad (4.39)$$

Der Term $L_{12} L_{21} / T L_{11}$ aus dem Ausdruck des thermischen Leitwerts wurde hier vernachlässigt, da dieser mit der Ordnung $\mathcal{O}(T^3)$ in der Temperatur geht.

4.5 Numerisch berechnete Lorenz-Zahlen

Die Gültigkeit des Wiedemann-Franz-Gesetzes haben wir nun analytisch mit den Landauer-Büttiker-Formeln für kleine Spannungen und Temperaturdifferenzen im letzten Abschnitt für $T \rightarrow 0$ gezeigt. In diesem Abschnitt betrachten wir nun das Verhalten der Lorenz-Zahl für kleine, aber endliche Temperaturen. Da hierfür allerdings Terme in höherer Ordnung von T

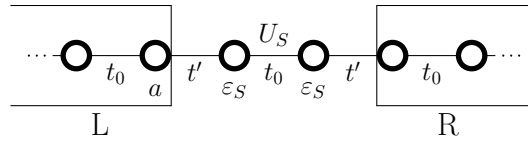


Abbildung 4.5: Zweiplatzmodell, bei dem Elektronen zwischen den beiden Plätzen in der Streuregion mit U_S wechselwirken können und zusätzlich ein Potential ε_S angelegt werden kann.

betrachtet werden müssen, können die Transportkoeffizienten nicht mehr im Allgemeinen berechnet werden, da diese von den Ableitungen der Transmissionsfunktion der jeweiligen Streuregion abhängen (s. Gl. (4.28) und Gl. (4.29)). Deshalb betrachten wir in diesem Abschnitt das Zweiplatzmodell (s. Abb. 4.5) und legen separat eine kleine Temperaturdifferenz $k_B \Delta T = 0.001 t_0$ und eine kleine Spannung $eV = 0.001 t_0$ an. So können wir auf numerische Weise mit dem Ladungs- und Wärmestrom die Transportkoeffizienten L_{ij} wie folgt bestimmen:

$$I = L_{11} \frac{\Delta\mu}{e} \quad (4.40)$$

$$I = L_{12} \frac{\Delta T}{T} \quad (4.41)$$

$$J^W = L_{21} \frac{\Delta\mu}{e} \quad (4.42)$$

$$J^W = L_{22} \frac{\Delta T}{T}. \quad (4.43)$$

Die Lorenz-Zahl kann dann mit $\mathcal{L} = L_{22}/(T^2 L_{11})$ berechnet werden, welche in Abb. 4.6 für einen Temperaturbereich von $0.004 t_0 < k_B T < 0.03 t_0$ abgebildet ist. Hier wurde das wechselwirkungsfreie System ($U_S = 0$) mit den Hoppingparametern $t' = 0.5 t_0$ und $t_S = t_0$ und dem chemischen Potential $\mu_S = 0$ für verschiedene Potentiale ε_S betrachtet.

Man kann erkennen, dass alle Graphen zum Wert 1 hin konvergieren, dies aber unterschiedlich schnell tun. Umso größer das Potential, desto schneller „entfernt“ sich der Graph von der gepunkteten Line, welche der analytisch berechneten Lorenz-Zahl \mathcal{L}_0 entspricht. Dieses Verhalten lässt sich anhand der Transmissionen des Zweiplatzmodells für verschiedene Werte des Potentials erklären, welche in Abb. 4.7 zu sehen sind. Da wir die Transmission $\mathcal{T}(E)$ und auch die Fermi-Verteilungen $f_{L,R}(E)$ um das chemische Potential $\mu_S = 0$ entwickelt hatten, spielen nur die Werte dicht um $E = 0$ der Transmission eine Rolle. Betrachtet man beispielsweise die

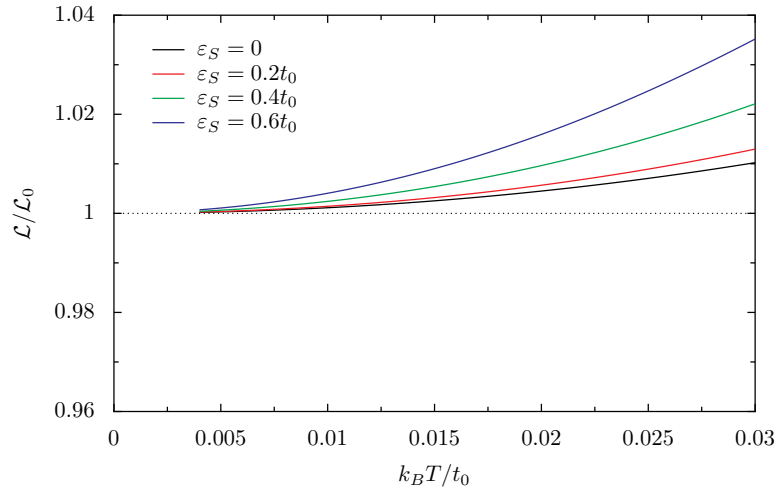


Abbildung 4.6: Numerisch berechnete Temperaturabhängigkeit der Lorenz-Zahl $\mathcal{L} = L_{22}/(T^2 L_{11})$ des wechselwirkungsfreien Zweiplatzmodells für verschiedene Werte des Potentials ε_S . Hier wurden die Parameter $t' = 0.5t_0$, $t_S = t_0$, $\mu_S = 0$, $\Delta\mu = 0.001t_0$ und $k_B\Delta T = 0.001t_0$ verwendet.

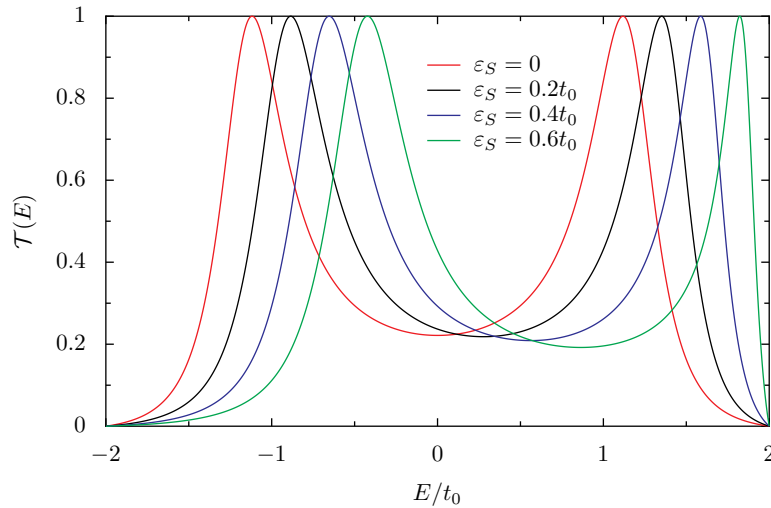


Abbildung 4.7: Transmissionen des wechselwirkungsfreien Zweiplatzmodells für verschiedene Potentiale ε_S in der Streuregion und $t' = 0.5t_0$.

erste Ableitung der Transmission am Punkt $E = 0$, so ist diese $\mathcal{T}^{(1)}(\mu_S = 0) = 0$ für das Potential $\varepsilon_S = 0$. Umso größer das Potential im Bereich $0 < \varepsilon_S < 0.6t_0$ wird, desto größer wird auch die erste Ableitung der Transmission und desto größer wird der Term $L_{12}L_{21}/TL_{11}$ aus dem Ausdruck des thermischen Leitwerts, welchen wir für die Lorenz-Zahl vernachlässigt hatten, da dieser mit der Ordnung $\mathcal{O}(T^3)$ in der Temperatur geht.

In Abb. 4.8 wird die Lorenz-Zahl mit dem zusätzlichen Term

$$\mathcal{L} = \frac{L_{22}}{T^2 L_{11}} - \frac{L_{12}L_{21}}{T^2 L_{11}}, \quad (4.44)$$

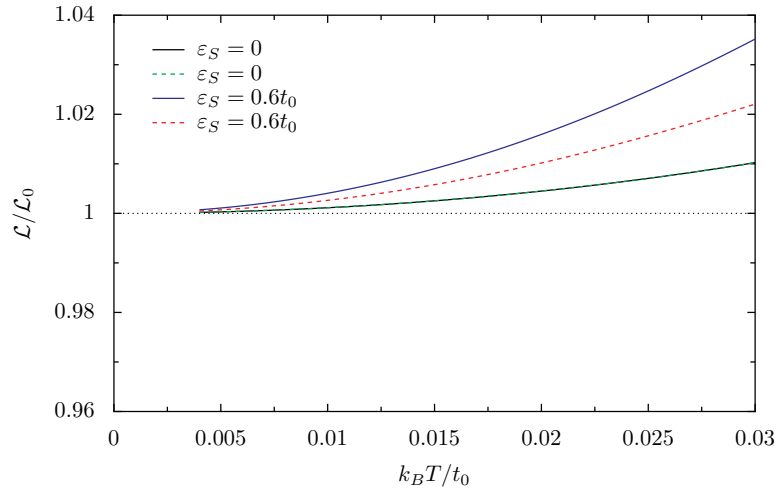


Abbildung 4.8: Vergleich der Lorenz-Zahlen $\mathcal{L} = (L_{11}L_{22} - L_{12}L_{21})/(T^2 L_{11})$ (gestrichelte Linien) mit der Lorenz-Zahl $\mathcal{L} = L_{22}/(T^2 L_{11})$ aus Abb. 4.6 (durchgezogene Linien) für die Potentiale $\varepsilon_S = 0$ und $\varepsilon_S = 0.6t_0$. Es wurden die gleichen Parameter wie in Abb. 4.6 verwendet.

welcher von der ersten Ableitung der Transmission abhängig ist (gestrichelte Linien), mit der Lorenz-Zahl ohne diesen Term aus Abb. 4.6 (durchgezogene Linien) verglichen.

Da die erste Ableitung der Transmission $\mathcal{T}^{(1)}(\mu_S = 0) = 0$ für $\varepsilon_S = 0$ verschwindet, erhalten wir die gleichen Ergebnisse der beiden Lorenz-Zahlen mit $\varepsilon_S = 0$. Vergleicht man hingegen die Lorenz-Zahlen mit dem Potential $\varepsilon_S = 0.6t_0$, liegt die Lorenz-Zahl mit dem Term $L_{12}L_{21}/TL_{11}$ näher am Wert 1, da hier die erste Ableitung der Transmission beachtet wird und $\mathcal{T}^{(1)}(\mu_S) \neq 0$ ist.

Als nächstes betrachten wir das Zweiplatzmodell aus Abb. 4.5 mit verschiedenen Wechselwirkungen U_S der Elektronen in der Streuregion, aber ohne das Potential ε_S . Alle anderen Parameter sind wie in Abb. 4.6 gewählt. Die Wechselwirkung wurde hier im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung behandelt.

Man erkennt in Abb. 4.9, dass auch hier das Wiedemann-Franz-Gesetz seine Gültigkeit behält und dass die Lorenz-Zahlen mit steigender Wechselwirkung für größere T näher am Wert 1 bleiben als im wechselwirkungsfreien Fall. Dieses Verhalten lässt sich wieder durch die zugehörigen Transmissionen des Systems erklären, welche in Abb. 4.10 zu sehen sind. Da alle Transmissionen bei $E = 0$ ein Minimum besitzen und deshalb die ersten Ableitungen der Transmissionen $\mathcal{T}^{(1)}(E = 0) = 0$ sind, spielt es hier keine Rolle, ob der Term $L_{12}L_{21}/TL_{11}$ beachtet wird oder nicht. Betrachtet man allerdings höhere Terme der Taylor-Entwicklung der Transmission um den Punkt $E = \mu_S = 0$, wie der Term mit der zweiten Ableitung $\mathcal{T}^{(2)}(E = 0)$, so stellt man fest, dass die Krümmung der Transmissionen bei steigender Wechselwirkung U_S abnimmt. Dies erklärt die „besseren“ Lorenz-Zahlen bei steigender Wechselwirkung U_S . Der Unterschied zwischen den Lorenz-Zahlen ist hier nicht so groß wie bei den Lorenz-Zahlen

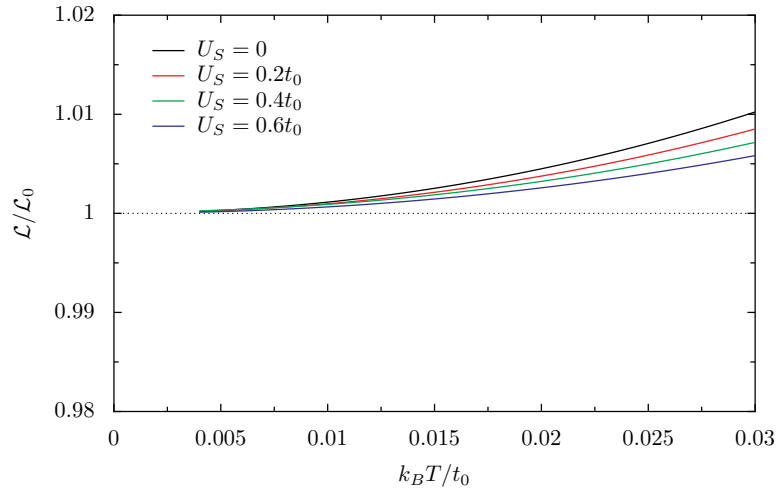


Abbildung 4.9: Die Lorenz-Zahl des wechselwirkenden Zweiplatzmodells in der Hartree-Fock-Näherung für verschiedene Werte von U_S und $\varepsilon_S = 0$. Alle anderen Parameter wurden wie in Abb. 4.6 gewählt.

mit verschiedenen Potentialen ε_S aus Abb. 4.6, da die Terme mit der zweiten Ableitung der Transmission bereits mit $\mathcal{O}(T^4)$ gehen.

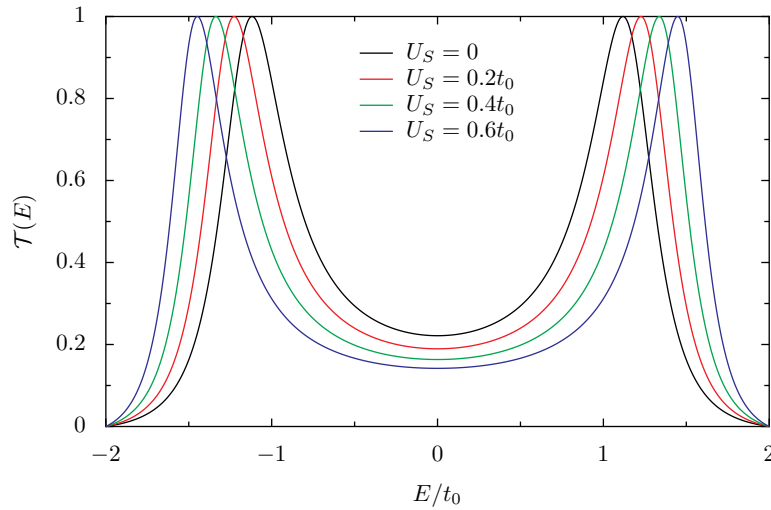


Abbildung 4.10: Transmissionen des wechselwirkenden Zweiplatzmodells mit verschiedenen Wechselwirkungen U_S . Für die Temperatur wurde $k_B T = 0.02 t_0$ gewählt, alle anderen Parameter sind die gleichen wie in Abb. 4.6.

Das Wiedemann-Franz-Gesetz gilt also auch bei den betrachteten wechselwirkenden Systemen in der Hartree-Fock-Näherung. Dies ist auch wenig verwunderlich, da bei der Hartree-Fock-Näherung freie Teilchen betrachtet werden, bei denen lediglich die Potentiale und Hoppingparameter der Streuregion modifiziert werden. Unter diesen Voraussetzungen ist die Herleitung für die Lorenz-Zahl aus dem letzten Abschnitt natürlich auch für solche Systeme gültig.

Im Allgemeinen gilt das Wiedemann-Franz-Gesetz aber nicht für wechselwirkende Elektronen. In der Publikation von Raimondi *et al.* [67] wurden wechselwirkende Elektronen in ungeordneten Metallen betrachtet, bei denen das Wiedemann-Franz-Gesetz aus Gl. (4.39) nicht bestätigt werden konnte.

4.6 Thermoelektrische Gütezahl und Wärmemaschinen

Wir haben uns nun als Beispiel für die Nützlichkeit der linearen Transportkoeffizienten mit dem Wiedemann-Franz-Gesetz auseinandergesetzt, bei dem wir den elektrischen und thermischen Leitwert (G und Ξ) benötigt hatten. Mit den Transportkoeffizienten lässt sich aber auch die thermoelektrische Gütezahl [68]

$$ZT = \frac{S^2 GT}{\Xi} \quad (4.45)$$

mit dem Seebeck-Koeffizienten S ausdrücken. Um die Effizienz von Wärmemaschinen abschätzen zu können, ist die Gütezahl ein wichtiger Wert, da diese direkt mit dem Wirkungsgrad wie folgt

$$\eta = \eta_C \frac{\sqrt{1 + ZT} - 1}{\sqrt{1 + ZT} + 1} \quad (4.46)$$

zusammenhängt [69], wobei $\eta_C = 1 - T_K/T_H$ der Carnot-Wirkungsgrad mit der kalten Temperatur T_K und der heißen Temperatur T_H darstellt. Umso höher der Wert der Gütezahl ZT liegt, desto besser sind die thermoelektrischen Eigenschaften eines Materials. Typische Werte von Materialien mit sehr guten thermoelektrischen Eigenschaften liegen heutzutage bei $ZT \approx 1$. Da man diesen Wert aber steigern möchte, um effizientere thermoelektrische Elemente herstellen zu können, wurde und wird in diesem Bereich viel geforscht. So publizierten beispielsweise Hicks und Dresselhaus [70], dass ZT größere Werte erreicht, umso kleiner die Dimension des Systems ist. Deshalb wird auch bei Wärmeelementen häufig mit Nanodrähten gearbeitet. Eine weitere wichtige Publikation wurde von Mahan und Sofo veröffentlicht [71], in denen sie herausfanden, dass die besten Energiefilter für Elektronen auch die Materialien mit den besten thermoelektrischen Eigenschaften darstellen.

Was bedeutet das nun, wenn wir eine quantenmechanische Wärmemaschine (im Tight-Binding-Modell) konstruieren möchten?

In wechselwirkungsfreien Systemen, sowie in Systemen bei denen die Wechselwirkung der Elektronen mit der Hartree-Fock-Näherung behandelt wurde, gelten für die Ströme die Landauer-Büttiker-Formeln. Diese hängen aber lediglich von der Transmission der Streuregion und der Differenz der Fermi-Verteilungen ab, welche wiederum von der Temperatur und dem chemischen Potential der Zuleitungen abhängen. Besitzen die Zuleitungen verschiedene Temperaturen $T_{L,R} = T \pm \Delta T/2$, so erhalten wir für die Differenz der Fermi-

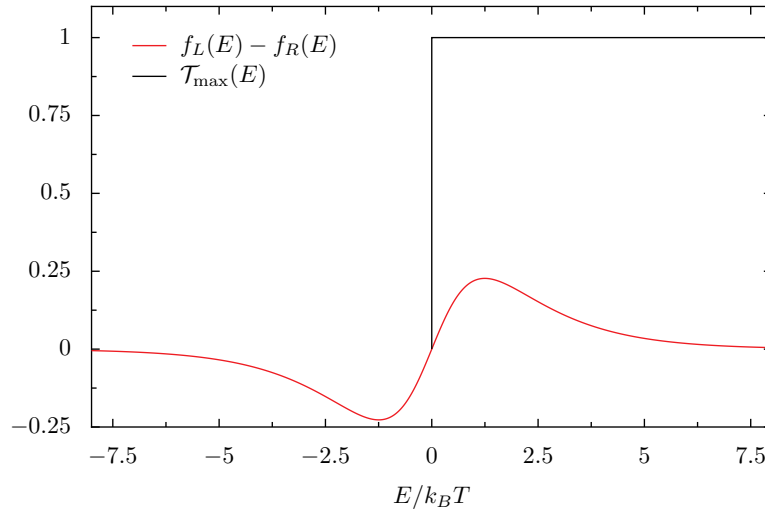


Abbildung 4.11: Differenz der Fermi-Verteilungen $f_L(E) - f_R(E)$ mit $\Delta T/T = 1$. Zudem wurde hier die Stufenfunktion als Transmission $\mathcal{T}_{\max}(E)$ eingezeichnet, welche den maximalen Ladungsstrom zur Folge hat.

Verteilungen

$$f_L(E) - f_R(E) = \left(e^{E/k_B T_L} + 1 \right)^{-1} - \left(e^{E/k_B T_R} + 1 \right)^{-1}, \quad (4.47)$$

wobei die chemischen Potentiale der Zuleitungen der Einfachheit halber mit $\mu_{L,R} = 0$ weggelassen wurden. In Abb. 4.11 ist die Differenz der Fermi-Verteilungen mit $\Delta T/T = 1$ abgebildet und man erkennt, dass die Funktion bei $E = 0$ einen Vorzeichenwechsel besitzt. Da wir beim Berechnen des Ladungsstroms mit der Landauer-Büttiker-Formel über alle Energien integrieren, erhalten wir mit der Stufenfunktion als Transmission

$$\mathcal{T}_{\max}(E) = \begin{cases} 1 & E > 0 \\ 0 & E < 0 \end{cases} \quad (4.48)$$

den maximalen Strom⁴ (s. Abb. 4.11). So wird über den kompletten positiven Anteil von $f_L(E) - f_R(E)$ integriert.

Wir suchen also für die Streuregion unseres Systems eine Transmission, welche nur Elektronen in einem bestimmten Energiebereich von einer Zuleitung in die andere tunneln lässt. Man spricht hier von einem Energiefilter für Elektronen. Dies wurde bereits unter anderem von Whitney [72] und Hershfield *et al.* [73] für eindimensionale Tight-Binding-Systeme untersucht. Wir werden im nächsten Kapitel Transmissionsfunktionen von speziell gewählten Strukturen mit gekoppelten Quantenpunkten in der Streuregion berechnen welche der rechteckigen Funktion aus Abb. 4.11 möglichst nahe kommen sollen.

⁴ Dies gilt natürlich auch wenn der Bereich der Transmission $\mathcal{T}_{\max}(-E)$ über alle negativen Werte von $f_L(E) - f_R(E)$ reicht.

5 Transmissionen als Energiefilter und die Nanowärmemaschine

In diesem Kapitel betrachten wir die Nanowärmemaschine genauer, bei der aus einer Temperaturdifferenz ein Ladungsstrom erzeugt wird. Im Kapitel 4 haben wir bereits diskutiert, dass thermoelektrische Elemente effizienter sind, wenn eine rechteckige Transmissionen vorliegt, um so den maximalen Ladungsstrom durch die Streuregion aus der Temperaturdifferenz in den Zuleitungen zu erzeugen. Deshalb werden wir uns in diesem Kapitel unter anderem mit der Frage beschäftigen, wie man im Rahmen des Tight-Binding-Modells eine Transmissionsfunktion implementieren kann, die dem idealen rechteckigen Verlauf möglichst nahe kommt¹.

5.1 Die Quantenpunkt-Nanowärmemaschine mit drei Zuleitungen

Im Jahr 2013 wurde von Jordan *et al.* [21] die in Abb. 5.1 gezeigte Nanowärmemaschine vorgeschlagen, welche durch quantenmechanische Effekte aus der Temperaturdifferenz $\Delta T = T_H - T_K$, mit $T_H > T_K$, einen Ladungsstrom I von der rechten zur linken Zuleitung (über das zentrale Reservoir) erzeugt. Die linke und die rechte Zuleitung sind jeweils durch einen Quantenpunkt mit dem zentralen Reservoir verbunden. Falls die Zuleitungen mit den tiefen Temperaturen nicht zusätzlich durch einen Verbraucher verbunden sind, baut sich mit der Zeit die Spannung V zwischen L und R auf, welche auch in Abb. 5.1 zu sehen ist. Da wir in den Zuleitungen verschiedene Temperaturen haben, wird zusätzlich der Wärmestrom J^W zwischen dem zentralen Reservoir und den Zuleitungen mit den tiefen Temperaturen erzeugt. Damit die Wärmemaschine für lange Zeiten konstante Ströme liefert, muss das chemische Potential des zentralen Reservoirs konstant sein. Um diese Bedingung zu gewährleisten, wählen wir die chemischen Potentiale mit

$$\mu_L = \mu_Z - \frac{eV}{2} \quad (5.1)$$

$$\mu_R = \mu_Z + \frac{eV}{2}, \quad (5.2)$$

1 In diesem Kapitel präsentieren wir zum Teil die Ergebnisse aus der Publikation [74].

symmetrisch um das chemische Potential des zentralen Reservoirs μ_Z , wobei wir im weiteren Verlauf $\mu_Z = 0$ wählen. Zudem betrachten wir die Temperaturen

$$T_K = T - \frac{\Delta T}{2} \quad (5.3)$$

$$T_H = T + \frac{\Delta T}{2} \quad (5.4)$$

symmetrisch um die mittlere Temperatur T .

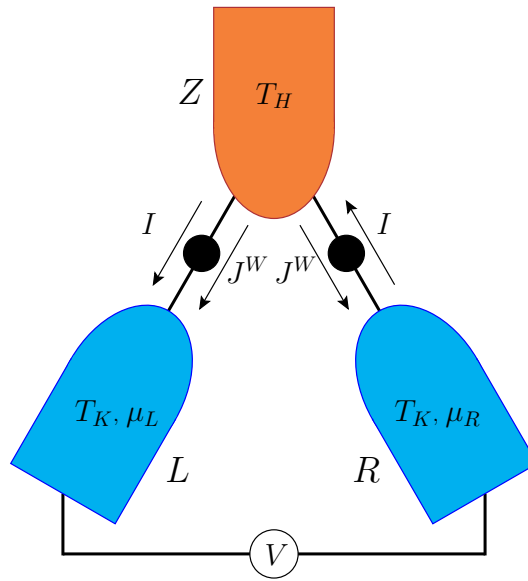


Abbildung 5.1: Wärmemaschine mit drei Zuleitungen, vorgeschlagen von Jordan *et al.* [21]. Die beiden unteren Zuleitungen besitzen die tiefere Temperatur T_K , das zentrale Reservoir die Temperatur T_H . Die Leads sind jeweils mit einem Quantenpunkt verbunden und mit der richtigen Konfiguration der Quantenpunkte werden aufgrund der Temperaturdifferenz Ladungsströme I von R nach Z und Z nach L erzeugt.

Verbindet man die Zuleitungen L und R zusätzlich mit einem Verbraucher (mit dem Widerstand R), so fließt der Ladungsstrom $I = V/R$ durch das gesamte System. Der Widerstand bestimmt dabei die Spannung V und damit die chemischen Potentiale μ_L und μ_R der Zuleitungen. Um herauszufinden, wie effizient die Wärmemaschine arbeitet, werden wir im weiteren Verlauf die Spannung berechnen, welche die Leistung

$$P_{\max} = [I(V)V]_{\max} \quad (5.5)$$

der Nanowärmemaschine maximiert. Der zur Leistung zugehörige Wirkungsgrad ist mit

$$\eta = \frac{P_{\max}}{2J^W} \quad (5.6)$$

gegeben. Wie üblich setzt sich der Wirkungsgrad aus der Leistung, welche die Wärmema-

schine abgibt, dividiert durch die Wärme ($2J^W$), welche dafür verwendet wird, zusammen. In den folgenden Auswertungen werden wir den Wirkungsgrad η_W mit dem Carnot-Wirkungsgrad

$$\eta_C = 1 - \frac{T_K}{T_H} \quad (5.7)$$

vergleichen, welcher einen perfekten Kreisprozess beschreibt und daher der höchste zu erreichende Wirkungsgrad mit den Temperaturen T_K und T_H darstellt [75].

Wie ist nun die Funktionsweise der Nanowärmemaschine?

Die energetische Besetzung der Elektronen in den wechselwirkungsfreien Zuleitungen ist, wie wir bereits wissen, durch die Fermi-Verteilung gegeben. Bei der Temperatur $T = 0$ ist die Fermi-Verteilung eine Stufenfunktion, wobei alle Zustände unter der Fermi-Kante besetzt und alle Zustände über der Fermi-Kante unbesetzt sind. Bei einer endlichen Temperatur ($T > 0$) gilt hingegen, umso höher die Temperatur ist, desto mehr weicht die Fermi-Kante auf.

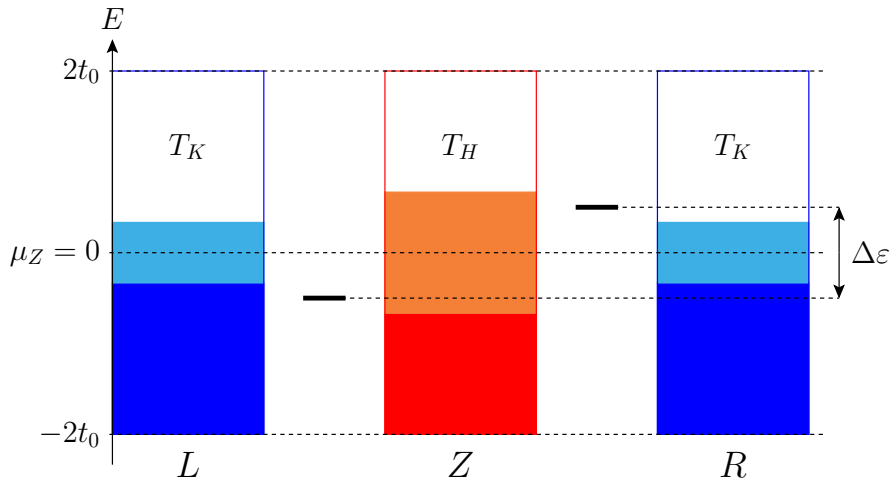


Abbildung 5.2: Prinzipielle Funktionsweise einer Nanowärmemaschine, bei der die Zuleitungen jeweils durch einzelne Quantenpunkte verbunden sind. Der hellere Farbton soll die Aufweichung der Fermi-Kante μ_Z darstellen, welcher bei tieferen Temperaturen weniger ausgeprägt ist, als bei höheren Temperaturen. Wir betrachten hier die Transmissionen der Quantenpunkte als sehr scharf um ein Energieniveau verteilt (schwarze Balken). Das Maximum der Transmissionen ist zusätzlich durch das Potential $\pm\Delta\varepsilon/2$ symmetrisch um die Fermi-Kante verschoben.

Die, durch die Fermi-Verteilung bestimmten Besetzungszahlen der Elektronen in den Zuleitungen sind in Abb. 5.2 schematisch abgebildet. Hier kann man erkennen, dass die Fermi-Kante bei der tiefen Temperatur T_K weniger aufgeweicht ist als die Fermi-Kante bei der hohen Temperatur T_H . Um nun einen Teilchenstrom von L nach Z und von Z nach R zu erzeugen, nutzen wir die unterschiedliche Besetzung der Zustände der Elektronen in den Zuleitungen aus. Zudem betrachten wir die Transmission der Quantenpunkte als sehr scharf

um ein Energieniveau verteilt, was durch die schwarzen Balken in Abb. 5.2 angedeutet wird.

„Verschiebt“ man das Maximum der Transmission zwischen der linken Zuleitung und des zentralen Reservoirs mit einem negativen Potential $-\varepsilon_S$ unter die Fermi-Kante $\mu_Z = 0$, so ist die Wahrscheinlichkeit eines besetzten Zustandes (im Energiebereich um das Maximum der Transmission) in der linken Zuleitung höher als in der zentralen. Damit erhalten wir einen Teilchenstrom von L nach Z . Verschiebt man das Energieniveau zwischen Z und R mit einem positiven Potential ε_S über die Fermi-Kante, fließt hier ein Teilchenstrom von Z nach R .

Durch die symmetrische Wahl der Potentiale mit $\pm\varepsilon_S$ relativ zur Fermi-Kante stellen wir sicher, dass das chemische Potential des zentralen Reservoirs beim Wert $\mu_Z = 0$ konstant bleibt. So gilt für die Differenz der Potentiale $\Delta\varepsilon = 2\varepsilon_S$. Mit der Wahl der Hoppingparameter t_0 und dem Potential $\varepsilon_0 = 0$ in allen Zuleitungen legen wir zudem fest, dass die Energiebänder von L , Z und R mit $E = -2t_0 \cos k$ gleich sind. Im weiteren Verlauf betrachten wir wieder die Ladungsströme, welche in die entgegengesetzte Richtung zum Teilchenstrom fließen.

Mit diesen Annahmen ist der Ladungsstrom $I_{Z \rightarrow L}$, welcher von Z nach L fließt und der Strom $I_{R \rightarrow Z}$, welcher von R nach Z fließt wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie mit

$$I = I_{Z \rightarrow L} = I_{R \rightarrow Z} \quad (5.8)$$

identisch. Analog gilt für den Wärmestrom

$$J^W = J_{Z \rightarrow R}^W = J_{Z \rightarrow L}^W, \quad (5.9)$$

wobei hier beachtet werden muss, dass beide Wärmeströme aus dem zentralen Reservoir in die Zuleitungen L und R fließen.

Eine wesentliche Vereinfachung aller folgenden Rechnungen besteht darin, dass wir die Wechselwirkung der Elektronen untereinander vernachlässigen. In Ref. [76] wurde die Wechselwirkung im Rahmen einer Hartree-Näherung behandelt, wobei die Parameter so gewählt wurden, dass die Besetzung der Elektronen auf den Quantenpunkten im Nichtgleichgewichtszustand sich gegenüber dem stromlosen Zustand nicht verändert. Es stellte sich jedoch heraus, dass sowohl die maximale Leistung, als auch der zugehörige Wirkungsgrad der Wärmemaschine im Rahmen dieser Näherung unverändert bleiben.

In den folgenden Abschnitten werden wir uns weiter mit den Wärmemaschinen auseinandersetzen, bei denen die Zuleitungen jeweils durch einen Quantenpunkt verbunden sind. Zunächst werden wir die inkohärente Wärmemaschine betrachten, bei der die Verbindungen

zwischen L nach Z und R nach Z räumlich sehr weit voneinander getrennt sind und dadurch die direkte Transmission von L nach R unterdrückt wird. Der andere Grenzfall, welchen wir diskutieren werden, ist die kohärente Wärmemaschine, bei der die Transmission von L nach R nicht unterdrückt wird.

5.1.1 Die inkohärente Wärmemaschine

Bei der inkohärenten Wärmemaschine sind die Verbindungen von L nach Z und R nach Z durch die Quantenpunkte räumlich sehr weit voneinander entfernt, wie in Abb. 5.3 zu erkennen ist. Dieses Modell hat damit den Vorteil, dass die Ladungsströme $I_{Z \rightarrow L}$ und $I_{R \rightarrow Z}$ durch die

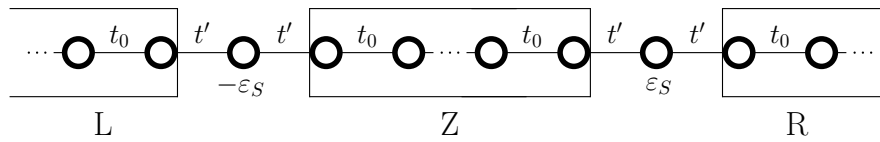


Abbildung 5.3: Inkohärente Wärmemaschine mit den drei Zuleitungen L , Z und R im Tight-Binding-Modell.

beiden Streuregionen getrennt voneinander berechnet werden können, da wir von sehr langen Zuleitungen ausgehen. Der Grund hierfür ist, dass die Dauer des zeitunabhängigen Stroms (stationäre Phase des Stroms) τ_S linear mit der Länge der Zuleitungen und des Reservoirs N mit $\tau_S \sim N\tau$ geht, was wir bereits im Kapitel 2 diskutiert hatten. Bildlich betrachtet benötigt ein Elektron, welches zuerst in das zentrale Reservoir tunnelt, also mehr Zeit um das gesamte zentrale Reservoir zu durchqueren, als die stationäre Phase des Stroms überhaupt besteht.

Da wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie in der inkohärenten Wärmemaschine sowohl die Ladungsströme als auch die Wärmeströme durch die beiden Streuregionen gleich sind, berechnen wir im Folgenden lediglich die Ströme zwischen L und Z . Zudem werden wir die Transmissionen der Wärmemaschinen in dieser Arbeit im Grenzfall $t_0 \gg t'$ mit der Wellenzahl $k_{L,R} \approx \pi/2$ betrachten, was einer konstanten Zustandsdichte entspricht². Die Transmission im Grenzfall $t_0 \gg t'$ mit einem Quantenpunkt in der Streuregion haben wir bereits in Abschnitt 2.4.2 berechnet und wissen, dass es sich um die Lorentz-Verteilung mit $\gamma = 2t'^2/t_0$ handelt. Damit ist die Transmission der inkohärenten Wärmemaschine von L nach Z mit

$$T_{L \rightarrow Z}(E) = \frac{1}{1 + \frac{(E + \epsilon_S)^2}{\gamma^2}} = T_{Z \rightarrow R}(-E) \quad (5.10)$$

gegeben, welche das Maximum bei $-\epsilon_S$ und die Breite γ besitzt.

² Betrachtet man nicht diesen Grenzfall, so hängt die Transmission stark von der Zustandsdichte der Zuleitungen ab. Dadurch wird die Form der Transmissionfunktion verändert, wenn das Potential ϵ_S verändert wird.

Im Folgenden werden wir nun die Leistung und den Wirkungsgrad der Wärmemaschine berechnen, welche wir bereits in Gl. (5.5) und Gl. (5.6) definiert hatten. In Abb. 5.4 ist die maxi-

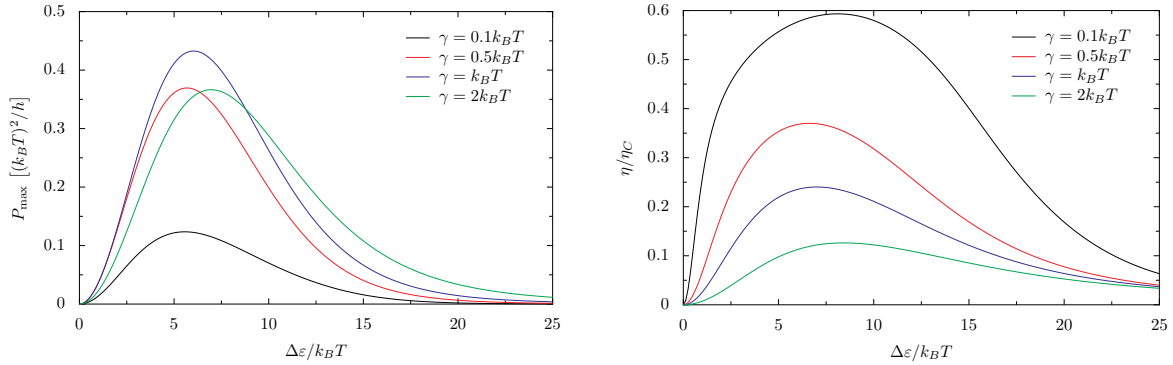


Abbildung 5.4: Maximale Leistung und Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine, aufgetragen gegen die Potentialdifferenz $\Delta\epsilon_S$. Es wurden verschiedene Werte von $\gamma = 2t'^2/t_0$ bei einer Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$ betrachtet.

male Leistung P_{\max} und der zugehörige Wirkungsgrad η/η_C auf das Potential $\Delta\epsilon$ aufgetragen. Es wurde eine relativ große Temperaturdifferenz mit $\Delta T/T = (T_H - T_K)/T = 1$ gewählt. Wir befinden uns also, im Gegensatz zu den Betrachtungen im letzten Kapitel, im nichtlinearen Bereich. Die Ströme können natürlich auch hier mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus berechnet wurden.

Sowohl die Leistung, als auch der Wirkungsgrad sind in Abb. 5.4 für verschiedene Werte von γ abgebildet und man kann erkennen, dass die Leistung ein Maximum als Funktion der Potentialdifferenz $\Delta\epsilon$ besitzt. Die Leistung erreicht den höchsten Wert für $\gamma \approx k_B T$. Auch der Wirkungsgrad besitzt jeweils ein Maximum als Funktion der Potentialdifferenz, allerdings erhalten wir die höchsten Wirkungsgrade, je kleiner γ ist.

Das Dilemma der Wärmemaschine, bei der die Zuleitungen jeweils mit einzelnen Quantenpunkten verbunden sind, ist also, dass bei der höchsten Leistung nicht der höchste Wirkungsgrad erreicht werden kann. In Abschnitt 5.2 werden wir jedoch feststellen, dass dies durch optimierte Transmissionen umgangen werden kann.

Ein weiterer Nachteil der inkohärenten Wärmemaschine ist die technische Umsetzung. Deshalb werden wir im nächsten Abschnitt diskutieren, wie die Nanowärmemaschine aufgebaut sein sollte, um diese im Experiment realisieren zu können.

5.1.2 Technische Umsetzung der Nanowärmemaschine

Sothmann *et al.* [77] schlugen die technische Realisierung der inkohärenten Wärmemaschine im Stil eines „Schweizer-Käse-Sandwiches“ vor, wie in Abb. 5.5 zu sehen ist. Hier sind die blauen Schichten die Zuleitungen mit der tieferen Temperatur T_K und die rote Schicht besitzt die höhere Temperatur T_H . Die gelben Kugeln stellen die Quantenpunkte dar, durch die die Elektronen in eine andere Zuleitung tunneln können. Das technische Problem dieser Umsetzung besteht darin, die mittlere Schicht zu erhitzen, ohne dass der Großteil der zugeführten Wärme direkt in die kälteren Schichten, beispielsweise über einen Phononenstrom, entweicht.

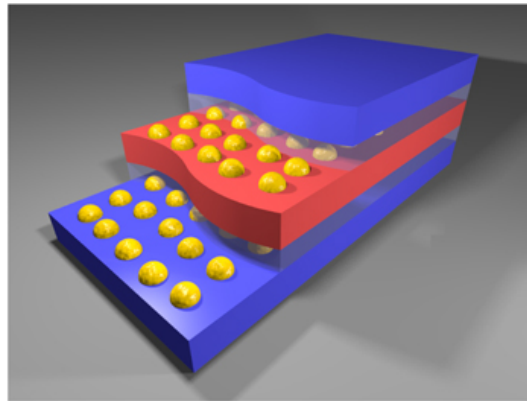


Abbildung 5.5: Grafik aus der Publikation von Sothmann *et al.* [77], welche vorschlugen, die inkohärente Wärmemaschine mit jeweils einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen durch ein „Schweizer-Käse-Sandwich“ technisch umzusetzen. Hier sind die blauen Schichten mit den tieferen Temperaturen T_K und die rote Schicht mit höheren Temperaturen T_H abgebildet. Die gelben Kugeln stellen hier die Quantenpunkte dar.

Technisch bereits umgesetzt ist die Wärmemaschine aus Abb. 5.6 (Abbildung von Thierschmann *et al.* [78]). Im linken Bild kann man den schematischen Aufbau dieser Wärmemaschine erkennen, im rechten Bild die experimentelle Umsetzung. Die blauen Objekte in der linken Abbildung stellen wieder die Zuleitungen mit der tiefen Temperatur dar, das rote Objekt das Reservoir mit der hohen Temperatur. Die gelben Kreise sind Quantenpunkte, welche nicht direkt verbunden sind, so dass die Elektronen nicht von einem Quantenpunkt zum anderen tunneln können. Die Elektronen können also über den unteren Quantenpunkt lediglich zwischen der linken und der rechten Zuleitung wechseln, vom heißen Lead aus können Elektronen auf den oberen Quantenpunkt tunneln. Der entscheidende Unterschied zu der von Jordan *et al.* (und von uns im Folgenden) betrachteten Wärmemaschine funktioniert diese Wärmemaschine nur mit Hilfe der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen auf den Quantenpunkten.

Das Prinzip der Wärmemaschine wird in Abb. 5.7 besser erläutert (Abbildung aus der Publikation von Thierschmann *et al.* [78]). In 5.7 werden die beiden Quantenpunkte als Zwei-

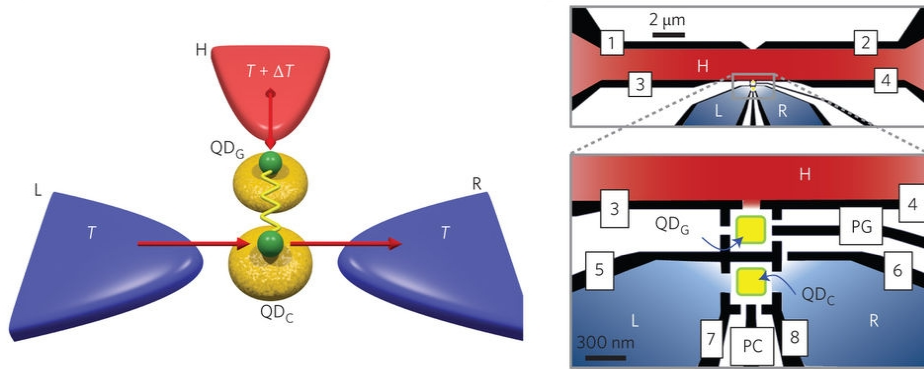


Abbildung 5.6: Abbildung aus der Publikation von Thierschmann *et al.* [78]. Im linken Bild ist der schematische Aufbau der Wärmemaschine, mit den blauen Zuleitungen (tiefe Temperaturen) und der roten Zuleitung (hohe Temperatur) zu sehen. Elektronen wechselwirken über die Coulombwechselwirkung zwischen den Quantenpunkten (gelbe Kreise), können aber nicht von einem Quantenpunkt zum anderen tunneln. Die roten Pfeile sollen verdeutlichen, wo sich die Elektronen bewegen können. Die rechte Abbildung gibt den experimentellen Aufbau der Wärmemaschine wieder, wobei auch hier die blauen Bereiche die kalten Zuleitungen darstellen und der rote Bereich das heiße Reservoir ist. In der Vergrößerung kann man auch die Quantenpunkte erkennen welche durch gelbe Quadrate markiert sind.

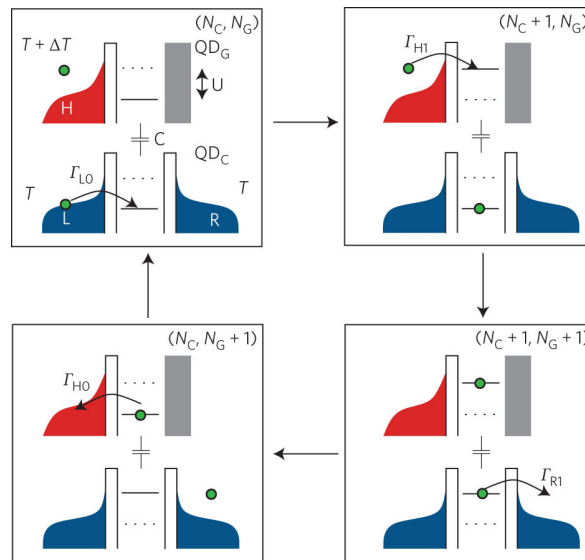


Abbildung 5.7: Grafik aus der Publikation von Thierschmann *et al.* [78] mit der Funktionsweise der Wärmemaschine aus Abb. 5.6. In den vier Bildern ist ein Zyklus der Wärmemaschine zu erkennen. In jedem der Bilder ist in der oberen Hälfte links die heißere Zuleitung mit den zwei Energieniveaus des oberen Quantenpunktes (gestrichelte und durchgezogene Linien) zu sehen. In der unteren Hälfte der Bilder sind die kalten Zuleitungen (links und rechts) mit den zwei Energieniveaus des unteren Quantenpunktes abgebildet. Die grünen Kreise stellen die Elektronen dar.

Energieniveausysteme dargestellt. Befindet sich nur ein Elektron in einem der beiden Quantenpunkte, besetzt es das niedrige Energieniveau. Sind hingegen beide Quantenpunkte besetzt, befinden sich beide Elektronen auf dem hohen Energieniveau. Dies wird in Abb. 5.7 jeweils mit der durchgezogenen und der punktierten Linie verdeutlicht. In jedem der vier Bilder ist oben links die heiße Zuleitung zu erkennen und die beiden Linien daneben stellen die beiden Energieniveaus des oberen Quantenpunkts dar. Unten sind die kalten Zuleitungen abgebildet, mit den beiden Energieniveaus des anderen Quantenpunktes.

Im Anfangszustand sind beide Quantenpunkte unbesetzt (Bild links oben in Abb. 5.7). Tunnelt ein Elektron nun von der linken Zuleitung aus auf den Quantenpunkt, besetzt es das untere Energieniveau. Wenn ein Elektron von der heißen Zuleitung auf den anderen Quantenpunkt tunnelt, besetzt es das obere Energieniveau. Zudem wird das Elektron im unteren Quantenpunkt wegen der Coulombwechselwirkung auf das höhere Energieniveau angehoben. Nun kann das Elektron vom unteren Quantenpunkt in die rechte Zuleitung tunnelt, was zur Folge hat, dass das Elektron im oberen Quantenpunkt auf das niedrige Energieniveau abgesenkt wird. Tunnelt das Elektron nun wieder in die heiße Zuleitung zurück, so befinden wir uns wieder im Anfangszustand.

Dies ist lediglich eine grobe Beschreibung der Funktion dieser Wärmemaschine und soll nur einen Eindruck davon geben, was im Moment technisch realisierbar ist. Genauer kann man das Prinzip der Wärmemaschine beispielsweise in den Publikationen [78] und [79] nachlesen. Allerdings kann die Wärmemaschine nicht die Leistungen erzielen wie die von Jordan *et al.* vorgeschlagene inkohärente Wärmemaschine [77], welche wir im letzten Abschnitt vorgestellt hatten. Deshalb wäre eine technische Umsetzung der inkohärenten Wärmemaschine erstrebenswert. Da es vermutlich technisch leichter realisierbar ist, wenn die Quantenpunkte räumlich eng beieinanderliegen, betrachten wir im nächsten Abschnitt die kohärente Wärmemaschine, welche ähnliche Leistungen und Wirkungsgrade erzielt wie die inkohärente Wärmemaschine.

5.1.3 Die kohärente Wärmemaschine

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns näher mit der kohärenten Wärmemaschine, welche in Abb. 5.8 zu sehen ist. Da hier - im Gegensatz zu dem im vorigen Abschnitt behandelten System - kohärentes Tunneln zwischen der linken und der rechten Zuleitung möglich ist, lässt sich das System nicht mehr in Untersysteme aufteilen. Um dennoch die Ströme durch die Streuregion bestimmen zu können, muss hier das Streuproblem für ein System mit drei Zuleitungen betrachtet werden. Der Hamiltonoperator der Zuleitungen ist

$$\hat{H}_L = -t_0 \sum_{l=1}^{a-1} \left(\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} + \text{h.c.} \right) \quad (5.11)$$

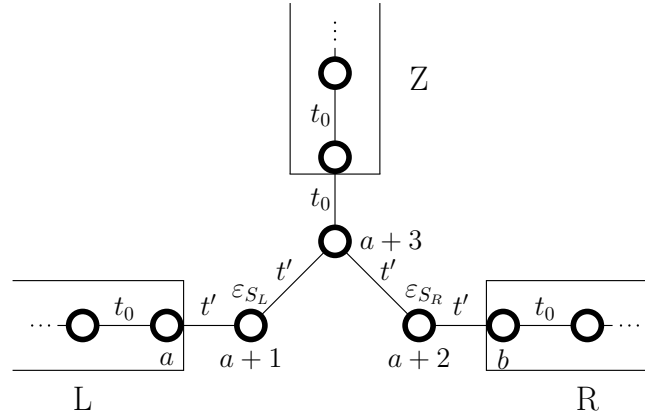


Abbildung 5.8: Modell der kohärenten Wärmemaschine, bei der die Streuregion mit den drei Zuleitungen L , Z und R verbunden ist. Im Gegensatz zur inkohärenten Wärmemaschine liegen die beiden Zuleitungen L und R eng beisammen.

$$\hat{H}_Z = -t_0 \sum_{l=a+3}^{b-2} \left(\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} + \text{h.c.} \right) \quad (5.12)$$

$$\hat{H}_R = -t_0 \sum_{l=b}^{N_{\text{ges}}-1} \left(\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l+1} + \text{h.c.} \right), \quad (5.13)$$

wobei N_{ges} die gesamte Anzahl der Gitterplätze im System ist. Der Hamiltonoperator der Streuregion

$$\begin{aligned} \hat{H}_S = & -t' \left(\hat{c}_a^\dagger \hat{c}_{a+1} + \text{h.c.} \right) - t' \left(\hat{c}_{a+1}^\dagger \hat{c}_{a+3} + \text{h.c.} \right) - t' \left(\hat{c}_{a+2}^\dagger \hat{c}_{a+3} + \text{h.c.} \right) \\ & - t' \left(\hat{c}_{a+2}^\dagger \hat{c}_b + \text{h.c.} \right) - \varepsilon_S \hat{n}_{a+1} + \varepsilon_S \hat{n}_{a+2} \end{aligned} \quad (5.14)$$

setzt sich aus den beiden Quantenpunkten zusammen, wobei wir die Potentiale, analog zur inkohärenten Wärmemaschine, mit $\varepsilon_{S_L} = -\varepsilon_S$ und $\varepsilon_{S_R} = \varepsilon_S$ wählen. Damit ist der Hamiltonoperator des gesamten Systems

$$H_{\text{ges}} = \hat{H}_L + \hat{H}_S + \hat{H}_Z + \hat{H}_R. \quad (5.15)$$

Analog zum System mit zwei Zuleitungen gehen wir von einer ebenen Welle aus, welche von der linken Zuleitung auf die Streuregion zuläuft. Die Wellenfunktionen der Zuleitungen sind dann

$$\psi_{L,Z,R}^{(j)} = \begin{cases} Ae^{ikj} + Be^{-ikj} & j \leq a \\ Ce^{ikj} & a+3 \leq j < b \\ De^{ikj} & b \leq j \end{cases}, \quad (5.16)$$

wobei die einfallende Amplitude wieder $A = 1$ ist. Da die Energiebänder der Zuleitungen identisch sind, ist auch die Wellenzahl k in allen Zuleitungen gleich. Damit erhalten wir mit der

Schrödinger-Gleichung $\hat{H}_{\text{ges}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ das folgende Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} t_0 e^{-ik} & -t' & 0 & 0 & 0 \\ -t' & -(E + \varepsilon_S) & -t' & 0 & 0 \\ 0 & -t' & t_0 e^{-ik} & -t' & 0 \\ 0 & 0 & -t' & -(E - \varepsilon_S) & -t' \\ 0 & 0 & 0 & -t' & t_0 e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_{S_L} \\ C \\ \psi_{S_R} \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -t_0 e^{ik} \\ t' \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

und berechnen damit die Transmission von L nach Z mit $\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E) = |C|^2$ und die Transmission von L nach R mit $\mathcal{T}_{L \rightarrow R}(E) = |D|^2$. Des Weiteren sind ψ_{S_L} und ψ_{S_R} die Wellenfunktionen des linken und des rechten Quantenpunkts. Das Gleichungssystem aus Gl. (5.17) lässt sich zwar analytisch lösen, man erhält für die Transmissionen jedoch einen unübersichtlichen Ausdruck. Da wir die Wärmemaschinen im Grenzfall $t_0 \gg t'$ betrachten, vereinfacht sich das Gleichungssystem mit $k \approx \pi/2$ folgendermaßen:

$$\begin{pmatrix} -it_0 & -t' & 0 & 0 & 0 \\ -t' & -(E + \varepsilon_S) & -t' & 0 & 0 \\ 0 & -t' & -it_0 & -t' & 0 \\ 0 & 0 & -t' & -(E - \varepsilon_S) & -t' \\ 0 & 0 & 0 & -t' & -it_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_{S_L} \\ C \\ \psi_{S_R} \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -it_0 \\ t' \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Damit erhält man für die Transmission von L nach R

$$\mathcal{T}_{L \rightarrow R}(E) = \frac{\gamma^4/4}{(E^2 - \varepsilon_S^2 - 3\gamma^2/4)^2 + 4\gamma^2 E^2} \quad (5.19)$$

und für die Transmission von L nach Z

$$\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E) = \frac{\gamma^2[(E - \varepsilon_S)^2 + \gamma^2/4]}{(E^2 - \varepsilon_S^2 - 3\gamma^2/4)^2 + 4\gamma^2 E^2}. \quad (5.20)$$

Die Transmission von R nach Z kann berechnet werden, indem man von einer ebenen Welle ausgeht, welche von der rechten Zuleitung aus auf die Streuregion zuläuft. So erhält man, analog zu Gl. (5.18), aus der Schrödinger-Gleichung ein lineares Gleichungssystem, mit dem dann die Transmission

$$\mathcal{T}_{R \rightarrow Z}(E) = \frac{\gamma^2[(E + \varepsilon_S)^2 + \gamma^2/4]}{(E^2 - \varepsilon_S^2 - 3\gamma^2/4)^2 + 4\gamma^2 E^2}. \quad (5.21)$$

bestimmt wird. Man kann an den analytischen Ausdrücken der Transmissionen $\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E)$ und $\mathcal{T}_{R \rightarrow Z}(E)$ erkennen, dass diese sich lediglich durch das Vorzeichen vor dem Potential ε_S im Zähler unterscheiden. Dies hat zur Folge, dass für die Funktionen der Transmissionen $\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(-E) = \mathcal{T}_{R \rightarrow Z}(E)$ gilt.

Nun vergleichen wir die Leistung und den Wirkungsgrad der kohärenten Wärmemaschine mit der Leistung und dem Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine. Da $\mu_R > \mu_L$ gilt, ist die direkte Transmission von L nach R bei der kohärenten Wärmemaschine hinderlich, da der Ladungsstrom $I_{L \rightarrow R}$ entgegengesetzt zum Ladungsstrom $I_{L \rightarrow Z}$ (und $I_{R \rightarrow Z}$) fließt, welcher von der Temperaturdifferenz erzeugt wird. Deshalb ist die kohärente Wärmemaschine effizienter, umso kleiner $\mathcal{T}_{L \rightarrow R}(E)$ ist.

In Abb. 5.9 sind die drei Transmissionen der kohärenten Wärmemaschine (Gl. (5.19) bis (5.21)) in Abhängigkeit der Energie aufgetragen. In der linken Abbildung wurde das Potential mit

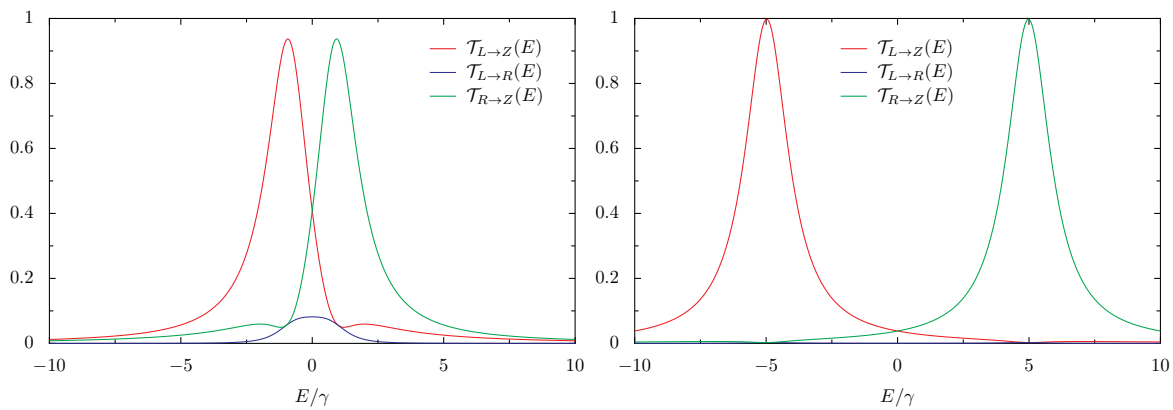


Abbildung 5.9: Transmissionen der kohärenten Wärmemaschine aus den Gl. (5.19) bis (5.21), aufgetragen auf die Energie mit der Potentialdifferenz $\Delta\varepsilon = 2\gamma$ (links) und $\Delta\varepsilon = 10\gamma$ (rechts).

$\varepsilon_S = \gamma$ gewählt. Hier erkennt man die Symmetrie der Transmissionen von L nach Z und R nach Z , was wir bereits analytisch festgestellt hatten. Des Weiteren erreichen die Maxima von $\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E)$ und $\mathcal{T}_{R \rightarrow Z}(E)$ nicht den Wert 1, fallen an einer Seite aber schneller ab als die Lorentz-Verteilung. Die Transmission von L nach R ist mit dem Potential $\varepsilon_S = \gamma$ bereits sehr klein, was für die Effektivität der kohärenten Wärmemaschine positiv ist.

Im rechten Bild von Abb. 5.9 sind die Transmissionen aus den Gl. (5.19) bis (5.21) mit dem Potential $\varepsilon_S = 5\gamma$ abgebildet. Hier verschwindet die Transmission von L nach R fast völlig für alle Energien. Die Transmissionen $\mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E)$ und $\mathcal{T}_{R \rightarrow Z}(E)$ hingegen haben jeweils ein Maximum mit $\mathcal{T}(E) = 1$ und besitzen zudem die Form einer Lorentz-Verteilung. Also können wir davon ausgehen, dass die Leistung und der Wirkungsgrad der inkohärenten und der kohärenten Wärmemaschine bei großen Werten von $\Delta\varepsilon$ gleich sind.

Mit den Transmissionen aus den Gleichungen (5.19) bis (5.21) können nun alle Ladungsströme zwischen den Zuleitungen der kohärenten Wärmemaschine mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus berechnet werden. Der gesamte Ladungsstrom, welcher in die linke Zuleitung hinein-, bzw. herausfließt, setzt sich mit

$$I_L = I_{L \rightarrow Z} + I_{L \rightarrow R} \quad (5.22)$$

zusammen. Wegen der Symmetrie der Potentiale mit $\pm\varepsilon_S$ der kohärenten Wärmemaschine ist der Ladungsstrom I_L und I_R mit

$$I_{L \rightarrow Z} + I_{L \rightarrow R} = I_{R \rightarrow Z} + I_{R \rightarrow L} = I \quad (5.23)$$

gleich. Es gilt also $I_{L \rightarrow Z} = I_{R \rightarrow Z}$, was wir bereits in Gl. (5.8) festgestellt hatten. Für die Berechnung des Ladungsstroms verwenden wir die Landauer-Büttiker-Formel in der folgenden Form

$$I = \frac{2e}{h} \sum_{\alpha=Z,R} \int dE \mathcal{T}_{L \rightarrow \alpha}(E) [f_L(E) - f_\alpha(E)]. \quad (5.24)$$

Da der Wärmestrom immer von der heißen Zuleitung zur kalten fließt, kann dieser analog zur inkohärenten Wärmemaschine behandelt werden, da wegen der gleichen Temperatur von L und R zwischen der linken und rechten Zuleitung kein Wärmestrom fließt. Zudem gilt wegen der Symmetrie der Potentiale $J^W = J_{Z \rightarrow L}^W = J_{Z \rightarrow R}^W$. So können wir den Wärmestrom mit

$$J^W = \frac{2}{h} \int dE \mathcal{T}_{L \rightarrow Z}(E) [f_Z(E) - f_L(E)] \quad (5.25)$$

berechnen.

Mit den Strömen I und J werden sowohl die maximale Leistung P_{\max} aus Gl. (5.5) als auch der zugehörige Wirkungsgrad η aus Gl. (5.6) wie bei der inkohärenten Wärmemaschine bestimmt.

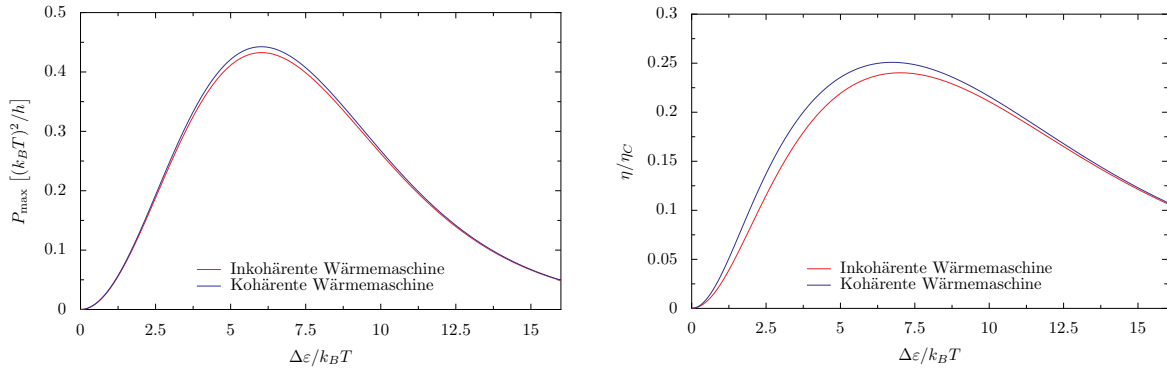


Abbildung 5.10: Im linken Bild wird die Leistung der inkohärenten Wärmemaschine mit der Leistung der kohärenten Wärmemaschine verglichen. In der rechten Abbildung ist der Vergleich der Wirkungsgrade beider Wärmemaschinen zu sehen. Es wurden die Parameter $\gamma = k_B T$ und $\Delta T/T = 1$ verwendet.

In Abb. 5.10 werden im linken Bild die maximalen Leistungen der kohärenten und der inkohärenten Wärmemaschine verglichen, im rechten Bild ist der Vergleich der Wirkungsgrade beider Wärmemaschinen abgebildet. Wie bereits vermutet, nähern sich die Kurven sowohl bei der Leistung als auch beim Wirkungsgrad für große Werte der Potentialdifferenz ab $\Delta\varepsilon \approx 12k_B T$ einander an. Für kleinere Werte der Potentialdifferenz erzielt die kohärente Wärmemaschine

sowohl bei der Leistung als auch beim Wirkungsgrad höhere Werte, obwohl hier die direkte Transmission von L nach R nicht vernachlässigbar ist. Dies liegt daran, dass die Transmissionen von L nach Z und R nach Z auf einer Seite steiler abfallen. In Abschnitt 4.6 haben wir bereits diskutiert, dass die Differenz der Fermi-Verteilungen in der Landauer-Büttiker-Formel bei einer Temperaturdifferenz einen Vorzeichenwechsel hat und deshalb die Wärmemaschine am effizientesten ist, wenn am Vorzeichenwechsel die Transmission möglichst schnell gegen den Wert 1 geht.

Wir haben in diesem Abschnitt also feststellen können, dass die inkohärente und die kohärente Wärmemaschinen nahezu die gleichen Leistungen und Wirkungsgrade liefern, die kohärente Wärmemaschine sogar die höheren Werte erzielen kann.

5.2 Die maximale Leistung der inkohärenten Wärmemaschine

Es hat sich also herausgestellt, dass eine Wärmemaschine, bei der die Zuleitungen jeweils durch einzelne Quantenpunkte verbunden sind, gute Werte für die Leistung und den Wirkungsgrad erzielen kann. Allerdings ist die Lorentz-Verteilung, welche die Transmission eines einzelnen Quantenpunkts im Grenzfall $t_0 \gg t'$ darstellt, nicht am effektivsten für die Wärmemaschine. Wie wir bereits in Abschnitt 4.6 festgestellt hatten, besitzt die Differenz der Fermi-Verteilung $f_L(E) - f_Z(E)$ einen Vorzeichenwechsel. Am effizientesten ist die Wärmemaschine also, wenn beim Integral aus der Landauer-Büttiker-Formel für den Ladungsstrom nur über den positiven oder den negativen Bereich der Differenz der Fermi-Verteilungen integriert wird.

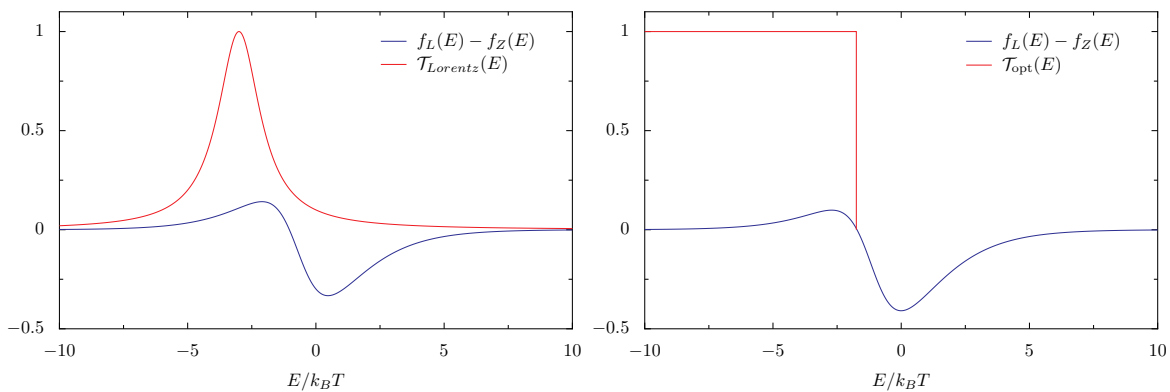


Abbildung 5.11: Im linken Bild ist der Vergleich der Transmission eines Quantenpunktes (Lorentz-Verteilung) mit $\gamma = k_B T$, mit einer typischen Differenz der Fermi-Verteilungen der inkohärenten Wärmemaschine abgebildet. Im rechten Bild hingegen die, für die inkohärente Wärmemaschine effektivere Transmission $\mathcal{T}_{\text{opt}}(E)$ (Stufenfunktion mit dem Sprung an der Nullstelle von $f_L(E) - f_Z(E)$).

In Abb. 5.11 (linkes Bild) ist die Differenz der Fermi-Verteilungen $f_L(E) - f_R(E)$ der inkohärenten Wärmemaschine am Maximum von P_{\max} aus Abb. 5.10 abgebildet. Dazu ist noch die zugehörige Transmission mit $\gamma = k_B T$ zu sehen. Man kann erkennen, dass die Lorentz-Funktion zu langsam abfällt und so im Integral für den Ladungsstrom über Werte mit verschiedenen Vorzeichen integriert wird, was den Ladungsstrom verkleinert.

Eine perfekte Transmission wäre also eine Stufenfunktion der Form

$$T_{\text{opt}}(E) = \begin{cases} 1 & E \leq b \\ 0 & E > b \end{cases}, \quad (5.26)$$

wobei b die Nullstelle der Differenz der Fermi-Verteilungen darstellt. Eine solche Transmission ist im rechten Bild von Abb. 5.11 abgebildet.

Robert Whitney hat in seiner Publikation [80] als erster veröffentlicht, dass die maximale Leistung der inkohärenten Wärmemaschine mit der Transmission $\mathcal{T}_{\text{opt}}(E)$ analytisch bestimmt werden kann, was wir nun im Folgenden nachvollziehen werden. Da die Ladungsströme von L nach Z und Z nach R gleich sind, betrachten wir den Quantenpunkt zwischen der linken und der zentralen Zuleitung. Mit der Transmission $\mathcal{T}_{\text{opt}}(E)$ vereinfacht sich die Landauer-Büttiker-Formel für den Ladungsstrom wie folgt

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^b dE [f_L(E) - f_Z(E)]. \quad (5.27)$$

Um das Integral zu lösen, betrachten wir zunächst das unbestimmte Integral über $f_L(E)$. Dieses lässt sich mit der Substitution $u = \exp[\beta_L(E - \mu_L)] + 1$ und der anschließenden Partialbruchzerlegung wie folgt lösen

$$\begin{aligned} \int dE f_L(E) &= \frac{1}{\beta_L} \int du \frac{1}{u^2 + u} = \frac{1}{\beta_L} \int du \left[\frac{1}{u-1} - \frac{1}{u} \right] \\ &= \frac{1}{\beta_L} [\ln |u-1| - \ln |u|] \end{aligned} \quad (5.28)$$

Da $u > 1$ ist, können die Beträge weggelassen werden und wir erhalten

$$\int dE f_L(E) = \frac{1}{\beta_L} \left[\beta_L(E - \mu_L) - \ln \left(e^{\beta_L(E - \mu_L)} + 1 \right) \right] \quad (5.29)$$

Das Integral über die Fermi-Verteilung $f_Z(E)$ kann analog zu $\int dE f_L(E)$ gelöst werden. Damit erhalten wir für den Ladungsstrom

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^b dE [f_L(E) - f_Z(E)] = \frac{2e}{h} \left[\frac{1}{\beta_L} \ln f_L(b) - \frac{1}{\beta_Z} \ln f_Z(b) \right]. \quad (5.30)$$

Mit $\beta_{L,Z} = (k_B T \mp k_B \Delta T / 2)^{-1}$ bringen wir den Ladungsstrom auf die folgende Form:

$$I = \frac{2e}{h} \left[k_B T \ln \frac{f_L(b)}{f_Z(b)} - \frac{k_B \Delta T}{2} \ln [f_L(b) f_Z(b)] \right]. \quad (5.31)$$

Als nächsten Schritt muss der Punkt b bestimmt werden. Dazu berechnen wir die Nullstelle von $f_L(E) - f_Z(E)$ bezüglich der Energie. Die Differenz der Fermi-Verteilungen ist mit

$$f_L(E) - f_Z(E) = \left[e^{\beta_L(E - \mu_L)} + 1 \right]^{-1} - \left[e^{\beta_Z E} + 1 \right]^{-1} = 0 \quad (5.32)$$

gegeben, wobei das chemische Potential der zentralen Zuleitung $\mu_Z = 0$ ist, da die Spannung zwischen L und R anliegt. Die Nullstelle befindet sich dann bei der Energie

$$E = \frac{\beta_L \mu_L}{\beta_L - \beta_Z} = b. \quad (5.33)$$

Setzt man nun b in die Fermi-Verteilungen ein, erhält man

$$f_L(b) = \left[e^{\frac{\mu_L}{k_B \Delta T}} + 1 \right]^{-1} = f_Z(b) \equiv f(b). \quad (5.34)$$

Damit vereinfacht sich der Ladungsstrom zu

$$I = \frac{2e}{h} k_B \Delta T \ln \left(e^{-\frac{eV}{2k_B \Delta T}} + 1 \right), \quad (5.35)$$

wobei hier für das chemische Potential $\mu_L = -eV/2$ eingesetzt wurde. Die Leistung der Wärmemaschine ist dann

$$P = IV = \frac{2e}{h} k_B \Delta T V \ln \left(e^{-\frac{eV}{2k_B \Delta T}} + 1 \right). \quad (5.36)$$

Um die maximale Leistung zu erhalten, bilden wir zunächst die erste Ableitung der Leistung nach der Spannung

$$\frac{dP}{dV} = \frac{2e}{h} k_B \Delta T \left[\ln \left(e^{-\frac{eV}{2k_B \Delta T}} + 1 \right) - \frac{e^{-\frac{eV}{2k_B \Delta T}}}{e^{-\frac{eV}{2k_B \Delta T}} + 1} \frac{eV}{2k_B \Delta T} \right]. \quad (5.37)$$

Das Maximum befindet sich an der Nullstelle der Funktion aus (5.37), welche wir folgendermaßen vereinfachen

$$(B_0 + 1) \ln(B_0 + 1) + B_0 \ln B_0 = 0, \quad (5.38)$$

wobei $B_0 = \exp(-eV/2k_B \Delta T)$. Gl. (5.38) lässt sich nicht analytisch nach B_0 auflösen. Deshalb werten wir die Gleichung numerisch aus und erhalten $B_0 \approx 0.3184$. Damit ist die maximale

Leistung der Wärmemaschine mit $\Delta T/T = 1$:

$$P_{\max} = \frac{4(k_B \Delta T)^2}{h} \ln B_0 \ln(B_0 + 1)^{-1} \approx 1.265 \frac{(k_B T)^2}{h}. \quad (5.39)$$

Um auch den zur Leistung P_{\max} zugehörigen Wirkungsgrad η der Wärmemaschine zu berechnen, muss zunächst die Landauer-Büttiker-Formel für den Wärmestrom mit der Transmission $\mathcal{T}_{\text{opt}}(E)$

$$J^W = \frac{2}{h} \int_{-\infty}^b dE E [f_Z(E) - f_L(E)] \quad (5.40)$$

berechnet werden. Dazu betrachten wir das unbestimmte Integral über die Fermi-Verteilung der linken Zuleitung, welches die folgende Stammfunktion besitzt [81]

$$\int dE E f_L(E) = \frac{E^2}{2} + \frac{E}{\beta_L} \ln f_L(E) - \frac{1}{\beta_L^2} \text{Li}_2 \left(-e^{\beta_L(E-\mu_L)} \right), \quad (5.41)$$

wobei der Polylogarithmus folgendermaßen definiert ist:

$$\text{Li}_2(\alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k^2}. \quad (5.42)$$

Damit erhalten wir für den Wärmestrom

$$J^W = \frac{2}{h} \left[\frac{E}{\beta_Z} \ln f_Z(E) - \frac{1}{\beta_Z^2} \text{Li}_2 \left(e^{\beta_Z E} \right) - \frac{E}{\beta_L} \ln f_L(E) + \frac{1}{\beta_L^2} \text{Li}_2 \left(e^{\beta_L(E-\mu_L)} \right) \right]_{-\infty}^b. \quad (5.43)$$

Mit der unteren Grenze des Integrals ($E \rightarrow -\infty$) verschwindet der Wärmestrom und wir erhalten mit der oberen Grenze des Integrals den Wärmestrom

$$J^W = \frac{2}{h} k_B T k_B \Delta T \left[\left(1 + \frac{\Delta T}{T} \right) \ln B_0 \ln(B_0 + 1)^{-1} - 2 \text{Li}_2(-B_0) \right]. \quad (5.44)$$

Der Wirkungsgrad der Wärmemaschine mit der maximalen Leistung P_{\max} aus Gl. (5.39) ist dann

$$\eta = \frac{P_{\max}}{2J^W} = \frac{\Delta T}{T} \left[\left(1 + \frac{\Delta T}{2T} \right) - \frac{2 \text{Li}_2(-B_0)}{\ln B_0 \ln(B_0 + 1)^{-1}} \right]^{-1}. \quad (5.45)$$

Mit $\Delta T/T = 1$ und $B_0 \approx 0.3184$ erhalten wir für den Wirkungsgrad

$$\eta/\eta_C \approx 0.445. \quad (5.46)$$

Wir haben nun analytisch berechnet, dass die maximal erreichbare Leistung der inkohärenten Wärmemaschine bei $P_{\max} \approx 1.265(k_B T)^2/h$ liegt. Bei dieser Leistung besitzt die Wärmemaschine den Wirkungsgrad $\eta/\eta_C \approx 0.445$.

Im nächsten Abschnitt werden wir möglichst rechteckige Transmissionen mit speziell präparierten Streuregionen konstruieren, welche aber immer eine endliche Breite besitzen werden. Um sowohl die Leistungen als auch die Wirkungsgrade der Wärmemaschinen mit verschiedenen Transmissionen besser vergleichen zu können, berechnen wir im Folgenden numerisch die Leistung und den Wirkungsgrad der inkohärente Wärmemaschine mit einer rechteckigen Transmission mit endlicher Breite w . Die Transmission zwischen L und Z hat dann die Form

$$\mathcal{T}_w(E) = \begin{cases} 0 & |E + \varepsilon_S| > w/2 \\ 1 & |E + \varepsilon_S| \leq w/2 \end{cases}. \quad (5.47)$$

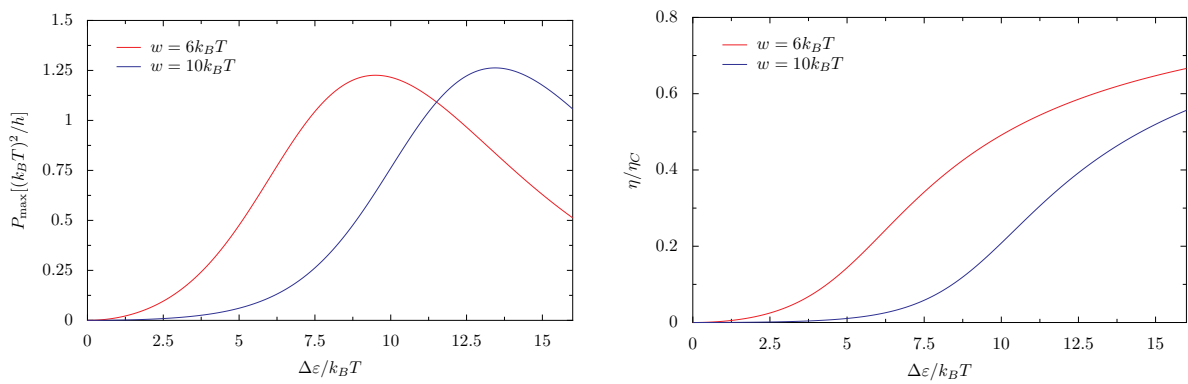


Abbildung 5.12: Maximale Leistung (links) und Wirkungsgrad (rechts) der inkohärenten Wärmemaschine mit der Transmission $\mathcal{T}_w(E)$ bei $\Delta T/T = 1$.

In Abb. 5.12 ist die Leistung und der Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine mit der rechteckigen Transmission $\mathcal{T}_w(E)$ mit $w = 6k_B T$ und $w = 10k_B T$ bei $\Delta T/T = 1$ abgebildet. Das Maximum der Leistung mit der Transmission $\mathcal{T}_{10}(E)$ liegt hier bei $P_{\max} \approx 1.263(k_B T)^2/h$, was dem optimalen Wert aus Gl. (5.39) bereits sehr nahe kommt. Bei der Transmission $\mathcal{T}_6(E)$ liegt das Maximum der Leistung $P_{\max} \approx 1.226(k_B T)^2/h$, was 3.2% unter dem idealen Wert liegt. Betrachtet man den Wirkungsgrad am Punkt $\Delta\varepsilon_{\max}$, an dem die Leistung das Maximum besitzt, so ist der Wirkungsgrad der Wärmemaschine mit der Transmission $\mathcal{T}_6(E)$ mit $\eta/\eta_C \approx 0.467$ und bei der Wärmemaschine mit der Transmission $\mathcal{T}_{10}(E)$ mit $\eta/\eta_C \approx 0.447$ gegeben. Die Werte des Wirkungsgrads bei steigender Breite w der Transmission nähern sich also von oben an den Wert aus Gl. (5.46) an.

5.3 Optimierte Transmissionen im Tight-Binding-Modell

Damit die Nanowärmemaschine effizient arbeitet, benötigen wir also möglichst rechteckige Transmissionen zwischen den Zuleitungen. In diesem Abschnitt konstruieren wir mit Hilfe von Quantenpunkten im Tight-Binding-Modell analytisch solche rechteckigen Transmissionen. Da wir bereits im Abschnitt 5.1.3 herausgefunden haben, dass die inkohärente und die kohärente Wärmemaschinen nahezu die gleichen Leistungen und Wirkungsgrade erzielen, werden wir uns der Einfachheit halber auf die inkohärente Wärmemaschine beschränken und deshalb die Ströme und Transmissionen zwischen den Zuleitungen L und Z berechnen.

5.3.1 Die homogene Kette

In diesem Abschnitt werden wir die homogene Kette von Gitterplätzen (s. Abb. 5.13) betrachten, bei der alle Hoppingparameter in der Streuregion mit t_S gleich gewählt sind. Zudem liegt an jedem Gitterplatz das Potential ε_S an. Die Transmission der homogenen Kette von Gitterplätzen

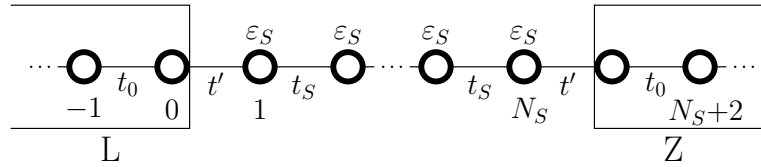


Abbildung 5.13: Homogene Kette von Gitterplätzen als Streuregion zwischen den Zuleitungen L und Z der inkohärenten Wärmemaschine.

als Streuregion kann im Tight-Binding-Modell analytisch berechnet werden, was bereits Mardaani *et al.* in der Publikation [82] veröffentlicht hatten.

Um die Transmission zu berechnen, lösen wir wieder die Schrödinger-Gleichung $\hat{H}_{\text{ges}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit einem ebenen Wellenansatz, wobei \hat{H}_{ges} der Hamiltonoperator aus Gl. (2.9) mit den Parametern $t'_L = t'_R = t'$, $t_L = t_R = t_0$, $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$, $\varepsilon_j = \varepsilon_S$ und $t_j = t_S$ ist. Wir gehen wieder davon aus, dass eine ebene Welle von der linken Zuleitung aus auf die Streuregion zuläuft. Die Wellenfunktionen in den Zuleitungen sind dann

$$\psi_{L,Z}^{(j)} = \begin{cases} Ae^{ikj} + Be^{-ikj} & j \leq 0 \\ C'e^{ikj} & N_S < j \end{cases}, \quad (5.48)$$

wobei die Amplitude der ankommenden Welle $A = 1$ ist. Die Wellenfunktion in der Streuregion ist mit

$$\psi_j = A'e^{iqj} + B'e^{-iqj} \quad (5.49)$$

gegeben, wobei $0 < j \leq N_S$ ist. Die Dispersionsrelation der Zuleitungen ist wieder $E = -2t_0 \cos k$.

Da die Streuregion eine homogene Kette mit dem Hoppingparameter t_S und dem Potential ε_S darstellt, kann auch hier eine Dispersionsrelation mit $E - \varepsilon_S = -2t_S \cos q$ angegeben werden. Damit ist k die Wellenzahl in den Zuleitungen und q die Wellenzahl in der Streuregion.

Aus der Schrödinger-Gleichung erhalten wir dann das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} -t_0(e^{ik} + Be^{-ik}) - t'\psi_1 &= E(1 + B) \\ -t'(1 + B) - t_S\psi_2 &= (E - \varepsilon_S)\psi_1 \\ -t_S\psi_{N_S-1} - t'C &= (E - \varepsilon_S)\psi_{N_S} \\ -t'\psi_{N_S} - t_0Ce^{ik} &= EC \end{aligned} \quad (5.50)$$

wobei $C = C' \exp[ik(N_S + 1)]$. In diesem Gleichungssystem haben wir sechs unbekannte Variablen, aber nur vier Gleichungen. Allerdings hängen die Wellenfunktionen in der Streuregion lediglich von den zwei Variablen A' und B' ab, welche in Abhängigkeit von $\psi_S^{(1)}$ und $\psi_S^{(N_S)}$ in der Form

$$A' = \frac{\psi_{N_S} - \psi_1 e^{-iq(N_S-1)}}{e^{iq(N_S-1)} - e^{-iq(N_S-1)}} \quad (5.51)$$

$$B' = \frac{\psi_1 e^{iq(N_S-1)} - \psi_{N_S}}{e^{iq(N_S-1)} - e^{-iq(N_S-1)}} \quad (5.52)$$

ausgedrückt werden können. A' und B' setzen wir nun in die Funktionen ψ_2 und ψ_{N_S-1} ein und erhalten

$$\psi_2 = \frac{\sin q}{\sin[(N_S - 1)q]} \psi_{N_S} + \frac{\sin[(N_S - 2)q]}{\sin[(N_S - 1)q]} \psi_1 \quad (5.53)$$

$$\psi_{N_S-1} = \frac{\sin q}{\sin[(N_S - 1)q]} \psi_1 + \frac{\sin[(N_S - 2)q]}{\sin[(N_S - 1)q]} \psi_{N_S}, \quad (5.54)$$

wobei ψ_2 und ψ_{N_S-1} nun nur noch von ψ_1 und ψ_{N_S} abhängen. Damit erhalten wir schließlich das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} t_0 e^{-ik} & -t' & 0 & 0 \\ -t' & t_S \frac{\sin N_S q}{\sin[(N_S-1)q]} & -t_S \frac{\sin q}{\sin[(N_S-1)q]} & 0 \\ 0 & -t_S \frac{\sin q}{\sin[(N_S-1)q]} & t_S \frac{\sin N_S q}{\sin[(N_S-1)q]} & -t' \\ 0 & 0 & -t' & t_0 e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_1 \\ \psi_{N_S} \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -t_0 e^{ik} \\ t' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.55)$$

C lässt sich analytisch aus diesem Gleichungssystem bestimmen und wir erhalten mit $\alpha = t'^2/t_0 t_S$ die Transmission der homogenen Kette mit

$$\mathcal{T}(E) = |C|^2 = \left| \frac{2\alpha \sin k \sin q}{e^{-ik} \sin[(N_S + 1)q] - 2\alpha \sin N_S q + \alpha^2 e^{ik} \sin[(N_S - 1)q]} \right|^2. \quad (5.56)$$

Im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ ($k \approx \pi/2$) erhalten wir mit $\alpha = 1$ den folgenden einfachen Ausdruck für die Transmission

$$T(E) = \frac{1}{1 + \cot^2 q \sin^2 N_S q}. \quad (5.57)$$

Der besseren Übersicht³ halber betrachten wir nun die homogene Kette mit dem Potential $\varepsilon_S = 0$. Die Transmissionen aus Gl. (5.56) und Gl. (5.57) mit dem Potential $\varepsilon_S = 0$ sind lediglich im Energiebereich $|E| < 2t_S$ oder dem Fall $t_0 \leq t_S$ definiert.

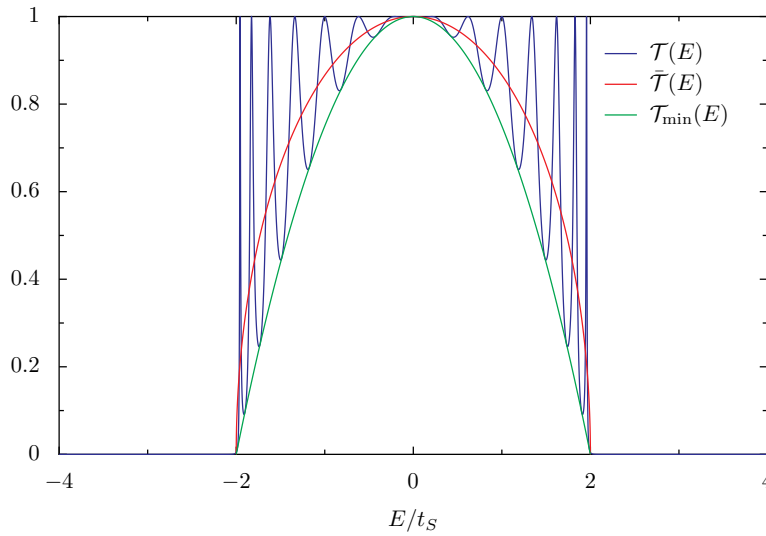


Abbildung 5.14: Transmission $\mathcal{T}(E)$ der homogenen Kette von Gitterplätzen im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ mit $N_S = 15$. Zusätzlich ist die untere Grenze der Transmission $\mathcal{T}_{\min}(E)$ und die gemittelte Transmission $\tilde{\mathcal{T}}(E)$ für große N_S abgebildet.

Gilt aber für die Hoppingparameter $t_0 > t_S$, so müssen wir die Funktion der Transmission für den Energiebereich $2t_S < |E| < 2t_0$ genauer betrachten. In diesem Energiebereich haben die Wellenfunktionen in der Streuregion die Form

$$\psi_j = \begin{cases} A'e^{qj} + B'e^{-qj} & -2t_0 < E < -2t_S \\ (-1)^j(A'e^{qj} + B'e^{-qj}) & 2t_S < E < 2t_0 \end{cases}, \quad (5.58)$$

wobei die Dispersionsrelation dann mit $|E| = 2t_S \cosh q$ gegeben ist. Löst man mit diesem Ansatz die Schrödinger-Gleichung, erhält man im Energiebereich $2t_S < |E| < 2t_0$ für die allgemeine Transmission der homogenen Kette von Gitterplätzen

$$\mathcal{T}(E) = \left| \frac{2\alpha \sin k \sinh q}{e^{-ik} \sinh[(N_S + 1)q] - 2\text{sign}(-E)\alpha \sinh N_S q + \alpha^2 e^{ik} \sinh[(N_S - 1)q]} \right|^2, \quad (5.59)$$

³ Die folgenden Überlegungen und Rechnungen sind auch für endliche Werte von ε_S definiert. Hierfür muss lediglich die Energie $E \rightarrow E - \varepsilon_S$ in der Wellenzahl q verändert werden.

wobei

$$\text{sign}(-E) = \begin{cases} 1 & E < 0 \\ -1 & E > 0 \end{cases}. \quad (5.60)$$

Die Transmission im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ ist im Energiebereich $2t_S < |E| < 2t_0$ dann

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + \coth^2 q \sinh^2 N_S q}. \quad (5.61)$$

Im Folgenden werden wir uns näher mit der Transmission im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ befassen (s. Gl. (5.57) und Gl. (5.61)), welche in Abb. 5.14 zu sehen ist. Für die Abbildung wurden $N_S = 15$ Gitterplätze in der Streuregion verwendet.

Für die Energien $|E| > 2t_S$ geht die Transmission mit $\mathcal{T}(E) \sim (E/2t_S)^{-2N_S}$ gegen den Wert 0. Dies kann man erkennen, indem man die Wellenzahl $q = \text{arcosh}(-E/2t_S)$ in den Ausdruck der Transmission aus Gl. (5.61) einsetzt. Damit erhält man mit $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ und $\text{arcosh } x = \ln(x + \sqrt{x^2 + 1})$

$$\mathcal{T}(E) = \frac{(E/2t_S)^2 - 1}{(E/2t_S)^2 - 1 + (E/4t_S)^2 \left[(\exp q)^N + (\exp -q)^N \right]^2} \sim \left(\frac{E}{2t_S} \right)^{-2N_S}. \quad (5.62)$$

Des Weiteren geht die Transmission an der Stelle $|E| = 2t_S$ für große Werte von N_S mit

$$\mathcal{T}(|E| = 2t_S) = (1 + N_S^2)^{-1} \quad (5.63)$$

gegen den Wert 0. Dies kann leicht nachvollzogen werden, indem wir die Funktionen $\sin^2 N_S q$ und $1/\cot^2 q = \tan^2 q$ aus Gl. (5.57) um $q = \arccos(-1) = \pi$ entwickeln und damit

$$\cot^2 q \sin^2 N_S q = \frac{\sin^2 N_S q}{\tan^2 q} \approx \frac{N_S^2 (q - \pi)^2}{(q - \pi)^2} = N_S^2 \quad (5.64)$$

erhalten.

Im Energiebereich $|E| < 2t_S$ besitzt die Transmissionsfunktion Maxima und Minima. Die Maxima liegen an den Nullstellen der Funktion $\cot^2 q \sin^2 N_S q$, wobei die Funktion $\cot^2 q$ eine Nullstelle bei $E = 0$ besitzt und die Funktion $\sin^2 N_S q$ ihre Nullstellen bei $E_\nu = -2t_S \cos q_\nu$ hat, wobei $q_\nu = \nu\pi/N_S$ und $1 \leq \nu < N_S - 1$. Die Minima der Transmission erhalten wir, wenn die Funktion $\sin^2 N_S q = 1$ maximal wird. Damit liegen die Minima auf der Kurve

$$T_{\min}(E) = (1 + \cot^2 q)^{-1} = 1 - \cos^2 q = 1 - \left(\frac{E}{2t_S} \right)^2, \quad (5.65)$$

was auch in 5.14 abgebildet ist. Damit hat die Transmissionsfunktion bei einer ungeraden

Anzahl von Gitterplätzen in der Streuregion N_S Maxima und $N_S - 1$ Minima, bei geraden N_S besitzt die Transmissionsfunktion $N_S - 1$ Maxima und $N_S - 2$ Minima.

Für große Werte von N_S oszilliert die Transmission also sehr stark. So kann für $N_S \rightarrow \infty$ bei der Funktion $\sin^2 N_S q \rightarrow \sin^2 \phi$ über eine halbe Periode gemittelt werden und wir erhalten so die mittlere Transmission

$$\bar{T}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{\pi} (1 + \cot^2 q \sin^2 \phi)^{-1} = \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2t_S}\right)^2}. \quad (5.66)$$

Das Integral lässt sich durch die Substitution $u = \tan \phi$ lösen. Die mittlere Transmission $\bar{T}(E)$ ist ebenfalls in Abb. 5.14 zu sehen und kann als Näherung zur Berechnung der Ströme mit der Landauer-Büttiker-Formel für Streuregionen mit großen N_S verwendet werden.

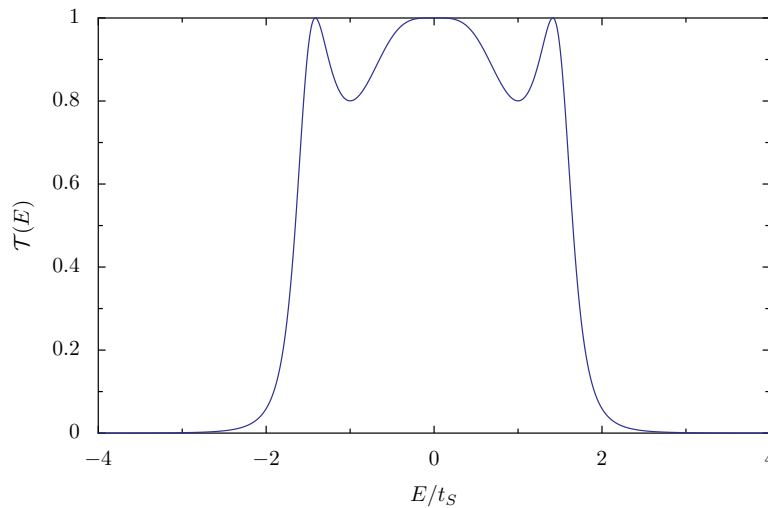


Abbildung 5.15: Transmission $\mathcal{T}(E)$ der homogenen Kette von Gitterplätzen im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ bei $N_S = 4$.

Die Transmissionsfunktion einer homogenen Kette von Gitterplätzen besitzt also im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ für $N_S > 3$ eine annähernd rechteckige Form, welche an den Rändern ($|E| > 2t_S$) schnell verschwindet. In Abb. 5.15 kann man erkennen, dass für $N_S = 4$ die Transmissionsfunktion mit dem Wert $\mathcal{T}(E) \approx 0.8$ sehr hochliegende Minima besitzt und daher der rechteckigen Form näher kommt als beispielsweise die Funktion der Transmission mit $N_S = 15$ aus Abb. 5.14. Wenn wir in Abschnitt 5.4 die Transmission für die inkohärente Wärmemaschine verwenden werden, wird sich herausstellen, dass für $N_S = 4$ die homogene Kette im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 1$ am effektivsten arbeitet. Man kann aber bereits jetzt deutlich erkennen, dass die homogene Kette als Verbindung zwischen den Zuleitungen für die Wärmemaschine besser geeignet ist, als der einzelne Quantenpunkt. Transmissionen

mit ähnlicher Struktur wie in Abb. 5.15 konnten auch in Streuproblemen mit periodischem Kastenpotential gefunden werden [83].

5.3.2 Der homogene Ring

Als zweites Beispiel für eine optimierte Transmission betrachten wir die homogene Ringstruktur als Streuregion zwischen den Zuleitungen, welche in Abb. 5.16 zu sehen ist. Auf dem Ring sind alle Hoppingparameter mit t_S und alle Potentiale mit ε_S gleich gewählt. Zudem sind die Zuleitungen symmetrisch durch den Hoppingparameter t' mit dem Ring verbunden, was heißt, dass die obere Kette und die untere Kette des Rings gleich lang sind.

Die Transmission des homogenen Rings kann, analog zur homogenen Kette von Gitterplätzen, analytisch berechnet werden. Dazu betrachten wir die Schrödinger-Gleichung $\hat{H}_{\text{ges}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, wobei \hat{H}_{ges} der Hamiltonoperator des Systems aus Abb. 5.16 ist. Wir gehen wieder von einer ebenen Welle aus, welche mit der Amplitude $A = 1$ von der linken Zuleitung aus auf die Streuregion zuläuft. Die Wellenfunktionen in den Zuleitungen sind dann mit

$$\psi_{L,Z}^{(j)} = \begin{cases} e^{ikj} + Be^{-ikj} & j \leq 0 \\ C'e^{ikj} & j > 2N_S \end{cases} \quad (5.67)$$

gegeben. Die Wellenfunktionen für die Streuregion ist für die obere Kette des Rings

$$\psi_j^o = A_o e^{iq_o j} + B_o e^{-iq_o j} \quad (5.68)$$

und für die untere Kette

$$\psi_j^u = A_u e^{iq_u j} + B_u e^{-iq_u j}, \quad (5.69)$$

wobei $0 \leq j \leq N_S$ ist. Die Dispersionsrelation ist in der Streuregion durch $E_{o,u} = -2t_S \cos q_{o,u}$ gegeben.

Aus der Schrödinger-Gleichung erhalten wir dann das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} -t_0 (e^{ik} + Be^{-ik}) - t'\psi_0 &= E(1 + B) \\ -t'(1 + B) - t_S\psi_1^o - t_S\psi_1^u &= (E - \varepsilon_S)\psi_0 \\ -t_S\psi_{N_S-1}^o - t_S\psi_{N_S-1}^u - t'C &= (E - \varepsilon_S)\psi_{N_S} \\ -t'\psi_{N_S} - t_0Ce^{ik} &= EC \end{aligned} \quad (5.70)$$

wobei hier $\psi_0 = \psi_0^o = \psi_0^u$ und $\psi_{N_S} = \psi_{N_S}^o = \psi_{N_S}^u$ ist. Da die Wellenfunktionen für die obere und untere Kette des Rings an den Plätzen 1 und $2N_S$ identisch sind, muss zwangsläufig

$$\psi_j = \psi_j^o = \psi_j^u = A'e^{iqj} + B'e^{-iqj} \quad (5.71)$$

für alle j gelten, da die Potentiale ε_S , die Hoppingparameter t_S und die Länge der Ketten gleich sind. Um die Anzahl der unbekannten Variablen im Gleichungssystem zu reduzieren, drücken wir die Amplituden der Wellenfunktionen in der Streuregion durch

$$A' = \frac{\psi_{N_S} - \psi_0 e^{-iqN_S}}{e^{iqN_S} - e^{-iqN_S}} \quad (5.72)$$

$$B' = \frac{\psi_0 e^{iqN_S} - \psi_{N_S}}{e^{iqN_S} - e^{-iqN_S}} \quad (5.73)$$

aus, wobei die Amplituden nur noch von den Wellenfunktionen ψ_0 und ψ_{N_S} abhängig sind.

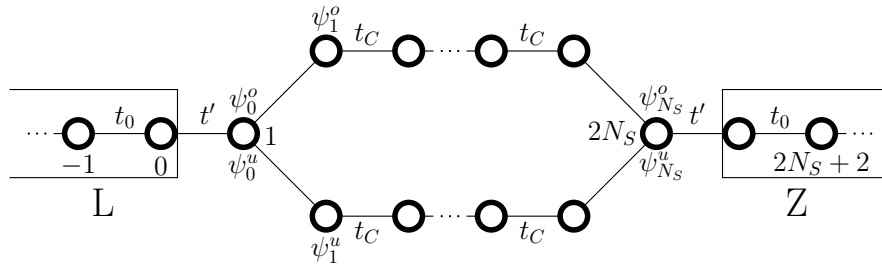


Abbildung 5.16: Homogener Ring als Streuregion zwischen den Zuleitungen L und Z . Zudem sind hier die Wellenfunktionen der oberen Kette ψ_j^o und der unteren Kette ψ_j^u abgebildet.

Damit erhalten wir für die Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_{N_S-1}

$$\psi_1 = \frac{\sin[(N_S - 1)q]}{\sin N_S q} \psi_0 + \frac{\sin q}{\sin N_S q} \psi_{N_S} \quad (5.74)$$

$$\psi_{N_S-1} = \frac{\sin q}{\sin N_S q} \psi_0 + \frac{\sin[(N_S - 1)q]}{\sin N_S q} \psi_{N_S}. \quad (5.75)$$

Unter Verwendung der Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_{N_S-1} vereinfacht sich das Gleichungssystem aus Gl (5.70) zu

$$\begin{pmatrix} t_0 e^{-ik} & -t' & 0 & 0 \\ -t' & 2t_S \frac{\sin q \cos N_S q}{\sin N_S q} & -2t_S \frac{\sin q}{\sin N_S q} & 0 \\ 0 & -2t_S \frac{\sin q}{\sin N_S q} & 2t_S \frac{\sin q \cos N_S q}{\sin N_S q} & -t' \\ 0 & 0 & -t' & t_0 e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_0 \\ \psi_{N_S} \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -t_0 e^{ik} \\ t' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.76)$$

Mit diesem Gleichungssystem kann die Amplitude C analytisch bestimmt werden und wir erhalten mit dem Parameter $\alpha = t'^2/t_0 t_S$ die Transmission des homogenen Rings

$$\mathcal{T}(E) = |C|^2 = \left| \frac{4\alpha \sin k \sin q \sin N_S q}{(2 \sin q \cos N_S q - \alpha e^{ik} \sin N_S q)^2 - 4 \sin^2 q} \right|^2, \quad (5.77)$$

welche im Energiebereich $|E| < 2t_S$ oder im Allgemeinen für $t_0 < t_S$ definiert ist.

Betrachtet man den homogenen Ring mit den Hoppingparametern $t_0 > t_S$, muss die Transmission für die Energien $2t_S < |E| < 2t_0$ nochmals berechnet werden. Dazu betrachten wir die Wellenfunktionen

$$\psi_j = \begin{cases} A'e^{qj} + B'e^{-qj} & -2t_0 < E < -2t_S \\ (-1)^j(A'e^{qj} + B'e^{-qj}) & 2t_S < E < 2t_0 \end{cases} \quad (5.78)$$

in der Streuregion und lösen damit die Schrödingergleichung. Damit erhält man im Energiebereich $2t_S < |E| < 2t_0$ die Transmission

$$\mathcal{T}(E) = \left| \frac{4\alpha \sin k \sinh q \sinh N_S q}{[2 \sinh q \cosh N_S q - \text{sign}(-E)\alpha e^{ik} \sinh N_S q]^2 - 4 \sinh^2 q} \right|^2. \quad (5.79)$$

Analog zur Transmission der homogenen Kette, erhalten wir im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und mit der Wahl des Parameters $\alpha = 2$ das einfache Resultat

$$\mathcal{T}(E) = \frac{4}{4 + (\cot q \cos q \sin N_S q)^2}, \quad (5.80)$$

welches im Energiebereich $|E| < 2t_S$ definiert ist. Für Energien im Bereich $2t_S < |E| < 2t_0$ erhalten wir für die Transmission

$$\mathcal{T}(E) = \frac{4}{4 + (\coth q \cosh q \sinh N_S q)^2}. \quad (5.81)$$

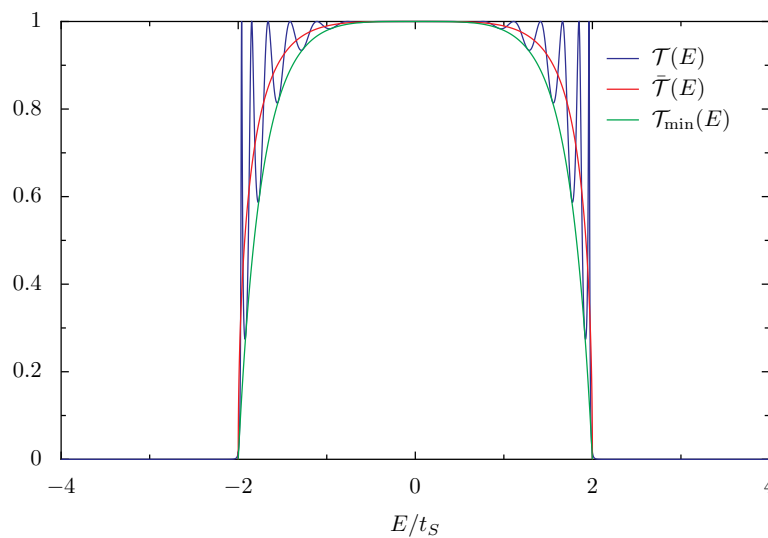


Abbildung 5.17: Transmission $\mathcal{T}(E)$ des homogenen Rings im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 2$ bei $N_S = 15$. Des Weiteren ist die untere Grenze der Transmission $\mathcal{T}_{\min}(E)$ und die gemittelte Transmission $\tilde{\mathcal{T}}(E)$ für $N_S \gg 1$ abgebildet.

Die Transmission im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $\alpha = 2$ ist in Abb. 5.17 mit $N_S = 15$ zu sehen. Diese wird maximal, wenn die Funktion $\cot q \cos q \sin N_S q$ verschwindet. Dazu berechnen wir die Nullstellen dieser Funktion, welche bei $E = 0$ und bei $E_\nu = -2t_S \cos q_\nu$ liegen, wobei $q_\nu = \nu\pi/N_S$ mit $1 \leq \nu < N_S$ ist. Die Minima der Transmission erhalten wir, wenn die Sinusfunktion $\sin^2 N_S q = 1$ maximal wird. Damit liegen alle Minima auf der Kurve

$$\mathcal{T}_{\min}(E) = \frac{4}{4 + \cot^2 q \cos^2 q} = \frac{4(1 - \cos^2 q)}{(2 - \cos^2 q)^2} = \frac{4[1 - (E/2t_S)^2]}{[2 - (E/2t_S)^2]^2}, \quad (5.82)$$

welche in Abb. 5.17 zu sehen ist.

Für große Werte von N_S lässt sich, analog zur Transmission der homogenen Kette, die mittlere Transmission $\bar{\mathcal{T}}(E)$ berechnen, indem wir über eine halbe Periode der Funktion $\sin N_S q = \sin \phi$ mit $-\pi/2 < \phi < \pi/2$ mitteln und erhalten damit

$$\bar{\mathcal{T}}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{\pi} \left[1 + \frac{1}{4} \cot^2 q \cos^2 q \sin^2 \phi \right]^{-1} = \frac{\sqrt{1 - (E/2t_S)^2}}{1 - E^2/8t_S^2}. \quad (5.83)$$

Analog zu Gl. (5.66) lässt sich das Integral mit der Substitution $u = \tan \phi$ lösen.

Entwickelt man nun die Transmission $\bar{\mathcal{T}}(E)$ um die Stelle $E = 0$, erhält man

$$\bar{\mathcal{T}}(E) = 1 - \frac{E^4}{8(2t_S)^4} + \mathcal{O}\left(\frac{E^6}{(2t_S)^6}\right). \quad (5.84)$$

Da die Transmission der linearen Kette mit $\bar{\mathcal{T}}(E) = 1 - (E/2t_S)^2$ geht, kann man hier bereits erkennen, dass die Transmission des Rings für die Wärmemaschine besser geeignet ist, da diese für kleine Energien mit $\bar{\mathcal{T}}(E) \approx 1 - (E/2t_S)^4$ langsamer abfällt, zudem bei Energien $|E| \sim 2t_S$ schneller gegen den Wert 0 geht.

5.3.3 Die inhomogene Kette

Als letztes Beispiel für eine möglichst rechteckige Transmission, betrachten wir in diesem Abschnitt die inhomogene Kette (s. Abb. 5.18). Bei der inhomogenen Kette hat sich herausgestellt, dass bei einer speziellen Wahl der Hoppingparameter t_j in der Streuregion Transmissionen existieren, welche keine Oszillationen besitzen und im Grenzfall $N_S \rightarrow \infty$ rechteckig sind [84].

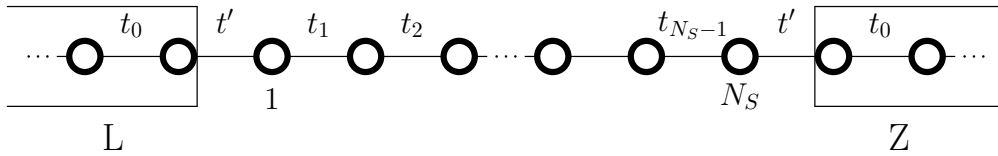


Abbildung 5.18: Inhomogene Kette als Streuregion zwischen den Zuleitungen L und Z .

Um diese Transmissionen zu berechnen, verwenden wir zunächst das Gleichungssystem aus Gl. (2.61) im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ ($k = k_L = k_R \approx \pi/2$) und erhalten

$$\begin{pmatrix} -it_0 & -t' & & & & \\ -t' & -E & -t_1 & & & \\ & -t_1 & -E & -t_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -t_{N_S-2} & -E & -t_{N_S-1} \\ & & & & -t_{N_S-1} & -E & -t' \\ & & & & & -t' & -it_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N_S-1} \\ \psi_{N_S} \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -it_0 \\ t' \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.85)$$

wobei $t' = t'_L = t'_R$, $\varepsilon_S = \varepsilon_j$ und $t_0 = t_L = t_R$. Wir betrachten das Gleichungssystem der besseren Übersichtlichkeit halber mit $\varepsilon_S = 0$. Berechnet man die Amplitude C aus dem Gleichungssystem (5.85) erhält man im Allgemeinen die Transmission

$$\mathcal{T}(E) = \left| \frac{2t_0 t'^2 \prod_{j=1}^{N_S-1} t_j}{D(E)} \right|^2, \quad (5.86)$$

wobei $D(E)$ die Determinante der Matrix aus Gl. (5.85) ist. Da in der Diagonale der Matrix aus Gl. (5.85) N_S -mal die Energie E steht, ist das Betragsquadrat der Determinante $|D(E)|^2$ im Allgemeinen ein Polynom der Ordnung $2N_S$. Des Weiteren definieren wir im Folgenden $t_j > 0$ und $t_j = a_j t_S$ mit $t_S = t'^2/t_0$. Damit hat die Transmission der inhomogenen Kette im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ die folgende Form

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{c_0 + c_1(E/\gamma)^2 + \dots + c_{N_S-1}(E/\gamma)^{2N_S-2} + (E/\gamma)^{2N_S}}, \quad (5.87)$$

wobei

$$\gamma = \left(2 \prod_{j=0}^{N_S-1} a_j \right)^{1/N_S} t_S \quad (5.88)$$

mit $a_0 = 1$. Im Fall $N_S = 1$ erhalten wir dann $\gamma = 2t^2/t_0$ und damit die Lorentz-Verteilung für die Transmission eines einzelnen Gitterplatzes, was wir in Gl. (2.65) berechnet hatten.

Wir beschäftigen uns nun mit der Frage, warum im Polynom des Nenners in Gl. (5.87) lediglich gerade Potenzen der Energie auftreten. Dazu betrachten wir die folgende Determinante einer Tridiagonalmatrix

$$f_n = \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{vmatrix}, \quad (5.89)$$

welche durch die Rekursionsformel [85]

$$f_n = \alpha_n f_{n-1} - \beta_{n-1}^2 f_{n-2} \quad (5.90)$$

berechnet werden kann, wobei $f_0 = 1$ und $f_{-1} = 0$ ist. Man kann hier erkennen, dass die in den Nebendiagonalen stehenden Parameter β_n immer quadriert werden. Es spielt also für die Transmissionsfunktion keine Rolle, welches Vorzeichen für die Hoppingparameter t_n in Gl. (5.85) gewählt wird. So können wir auch das Vorzeichen aller Hoppingparameter umdrehen, sodass wir dann die Determinante $-D(-E)$ erhalten. Da wir bei der Berechnung der Transmissionsfunktion $|D(E)|^2$ betrachten, muss damit $\mathcal{T}(E) = \mathcal{T}(-E)$ gelten. Die Transmissionsfunktion ist also im Allgemeinen achsensymmetrisch und daher dürfen im Polynom von $|D(E)|^2$ keine ungeraden Potenzen der Energie auftreten.

Für $E = 0$ verschwinden alle Terme der Transmission bis auf c_0 . In diesem Fall kann die Determinante $D(0)$ der Matrix aus Gl. (5.85) ausgewertet werden und man erhält

$$c_0 = \left(\frac{p_g^2 + p_u^2}{2p_g p_u} \right)^2, \quad (5.91)$$

mit

$$p_g = \prod_{j \text{ gerade}} a_j, \quad p_u = \prod_{j \text{ ungerade}} a_j. \quad (5.92)$$

Die maximale Transmission ($\mathcal{T}(0) = 1$) bei $E = 0$ erhält man damit bei $p_g = p_u$, wobei dann $c_0 = 1$ ist. Damit eine möglichst rechteckige Transmission konstruiert werden kann, wählt man die Parameter a_j derart, dass die Oszillationen gänzlich unterdrückt werden. Dies ist

N_S	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
2	1					
3	$1/\sqrt{2}$					
4	$\sqrt{\sqrt{2}-1}$	$\sqrt{2}-1$				
5	$\sqrt{5}/2 - 1/2$	$\sqrt{\sqrt{5}/2 - 1}$				
6	$\sqrt{\sqrt{3}/2 - 1/2}$	$\sqrt{3\sqrt{3}/2 - 5/2}$	$2 - \sqrt{3}$			
7	0.597408	0.296896	0.234432			
8	0.593	0.287	0.216	0.199		
9	0.589	0.281	0.205	0.179		
10	0.587	0.276	0.197	0.167	0.158	
11	0.585	0.273	0.192	0.158	0.145	
12	0.584	0.270	0.188	0.152	0.136	0.132
13	0.583	0.268	0.185	0.148	0.130	0.122

Tabelle 5.1: Parameter a_j , bei denen die Transmissionfunktion der inhomogenen Kette durch Gl. (5.93) beschrieben werden kann. Die Parameter wurden für $N_S \leq 7$ analytisch berechnet und für $7 < N_S \leq 13$ numerisch mit Hilfe des Newton'schen Verfahrens bestimmt.

nur möglich, wenn $c_1 = c_2 = \dots = c_{N_S-1} = 0$ gilt und somit die Transmissionsfunktion durch

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + (E/\gamma)^{2N_S}}. \quad (5.93)$$

gegeben ist. Da aber die Parameter c_j im Allgemeinen Polynome $2N_S$ -ten Grades in a_j sind, muss ein nichtlineares Gleichungssystem in $2N_S$ -ter Ordnung gelöst werden. Daher können die Parameter a_j nur bis $N_S \leq 7$ analytisch bestimmt werden. Für größere Werte von N_S wurde das Newton'sche Verfahren zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems verwendet [86]. Im Anhang A.1 werden als Beispiel die Parameter a_1 und a_2 der inhomogenen Kette mit vier Gitterplätzen berechnet.

In Tabelle 5.1 sind die Parameter a_j für $N_S \leq 13$ gegeben. Die Parameter a_j sind in allen berechneten Fällen reell und mit $a_j = a_{N_S-j}$ symmetrisch, weswegen in Tabelle 5.1 lediglich die Parameter a_j der linken Hälfte der inhomogenen Kette (s. Abb. 5.18) gegeben sind.

Wir wissen also nun, dass die Transmission der inhomogenen Kette mit den speziellen Parametern a_j im Fall $N_S = 1$ die Lorentz-Verteilung aus Gl. (2.65) ergibt und im Grenzfall $N_S \rightarrow \infty$ die Transmissionsfunktion ein perfektes Rechteck bildet. Bisher ist es allerdings nicht gelungen, das nichtlineare Gleichungssystem für $N_S > 13$ zu lösen, oder gar eine allgemeine Lösung für beliebige N_S zu finden.

In Abb. 5.19 ist die Transmission mit den speziellen Parametern a_j bei $N_S = 5$ und $N_S = 10$ zu sehen. Wie wir bereits erwartet hatten, ist die Transmission für größere N_S fast rechteckig,

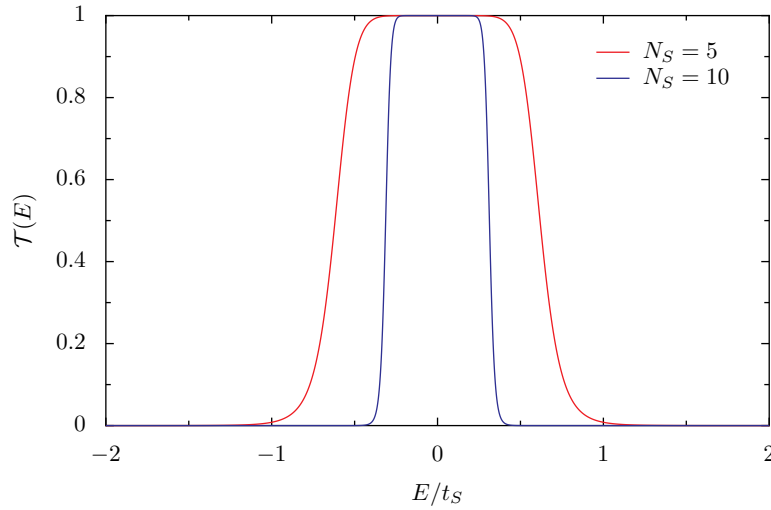


Abbildung 5.19: Transmission $\mathcal{T}(E)$ der inhomogenen Kette im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ und $t'^2 = t_0 t_S$ mit den speziellen Parametern a_j aus Tabelle 5.1.

wird aber bei steigenden N_S auch schmaler. Man kann dem allerdings entgegenwirken, indem t_S größer gewählt wird.

5.4 Die Wärmemaschine mit optimierten Transmissionen

Wir haben im letzten Abschnitt drei Arten von Transmissionsfunktionen diskutiert, welche sowohl die Leistung, als auch den Wirkungsgrad der Nanowärmemaschine steigern sollten. In Abb. 5.20 vergleichen wir nun die maximale Leistung und den zugehörigen Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine mit verschiedenen Streuregionen.

Die gestrichelten Kurven sind die bereits diskutierten Ergebnisse der inkohärenten Wärmemaschine. Zum einen die Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen mit $\gamma = k_B T$ (grün) aus Abb. 5.4, zum anderen die „perfekte“ Streuregion mit der rechteckigen Transmission $\mathcal{T}_w(E)$ mit $w = 6k_B T$ (rot) aus Abb. 5.12.

Die durchgezogenen Linien geben die Leistung und den Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine mit den optimierten Streuregionen aus dem letzten Abschnitt wieder. Dazu wurde bei der homogenen Kette (rot) und dem homogene Ring (blau) der Hoppingparameter $t_S = 1.5k_B T$ gewählt und bei der inhomogenen Kette (grün) der Parameter $\gamma = 3k_B T$ verwendet. Damit haben alle Transmissionsfunktionen, welche wir vergleichen, die gleiche Breite⁴ von $6k_B T$. Bei den optimierten Transmissionen wurden in Abb. 5.20 die Werte $N_S = 5$ ((a) und (b)) und $N_S = 10$ ((c) und (d)) verwendet.

⁴ Ausgenommen die Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen. Hier wurde mit $\gamma = k_B T$ der Wert verwendet, welcher die höchste Leistung liefert.

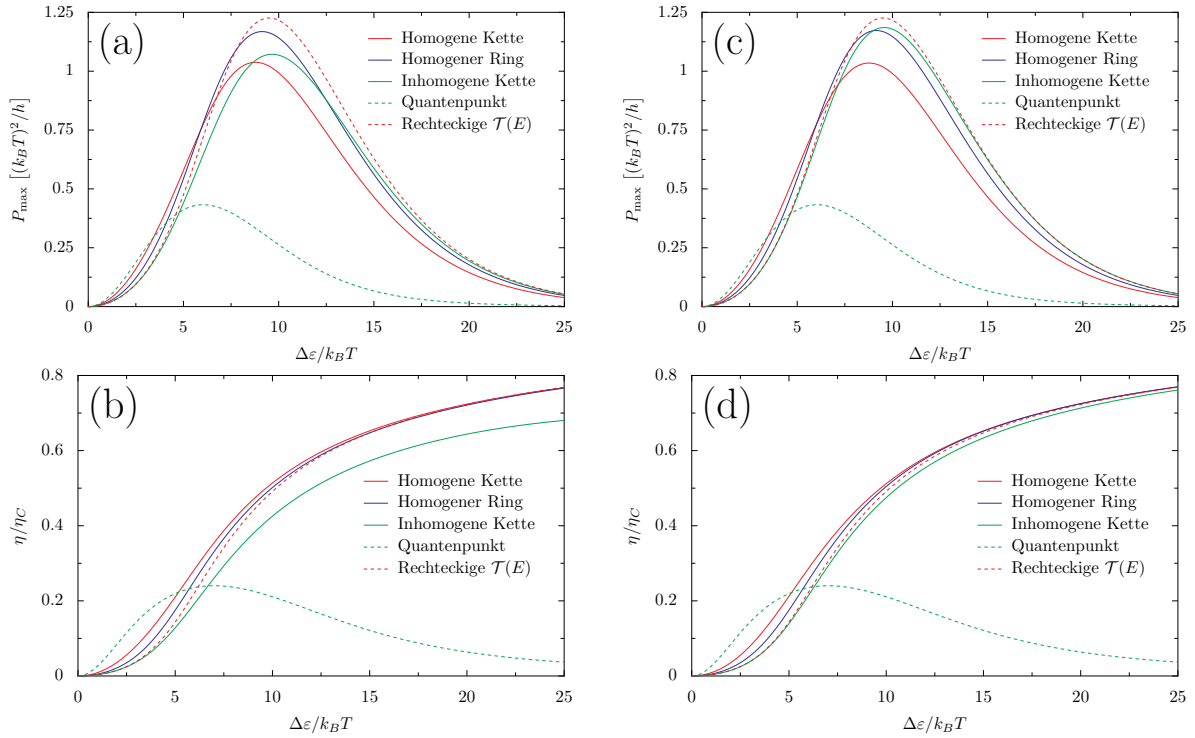


Abbildung 5.20: Maximale Leistung und Wirkungsgrad bei maximaler Leistung der inkohärenten Wärmemaschine für verschiedene Transmissionen. Hier wurden für die Streuregion die Parameter $\gamma = k_B T$ (einzelne Quantenpunkte), $t_S = 1.5 k_B T$ (homogener Ring und homogene Kette), $\gamma = 3 k_B T$ (inhomogene Kette) und $w = 6 k_B T$ (rechteckige Transmission) bei der Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$ verwendet. Zudem wurde $N_S = 5$ in (a) und (b) und $N_S = 10$ in (c) und (d) gewählt.

Man kann erkennen, dass die Wärmemaschinen mit den optimierten Transmissionsfunktionen also mindestens die doppelte Leistung (Maximum von P_{\max}) erreichen, verglichen mit der Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten. Die Wärmemaschinen mit dem homogenen Ring und der inhomogenen Kette als Streuregion mit $N_S = 10$ kommen sogar sehr nah an die ideale Leistung (Wärmemaschine mit der rechteckigen Transmission $\mathcal{T}(E)$) heran. Auch der Wirkungsgrad beim Maximum der Leistungskurven ist bei den Wärmemaschinen mit den optimierten Transmissionsfunktionen, verglichen mit der Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten, nahezu doppelt so groß.

Vergleicht man die Leistungen und die Wirkungsgrade der Wärmemaschinen mit den optimierten Transmissionsfunktionen bei verschiedenen Werten von N_S , stellt man fest, dass die maximale Leistung und der Wirkungsgrad der Wärmemaschinen mit der homogenen Kette und dem homogenen Ring als Streuregion für $N \gtrsim 4$ nahezu konstant bleiben. Die Wärmemaschine mit der inhomogenen Kette hingegen wird erst für größere Werte von N_S effizienter. Dies liegt daran, dass die Transmissionsfunktionen der homogenen Kette und des homogenen Rings bereits bei Werten von $N_S \approx 4$ an den Rändern sehr schnell abfallen, was bei der inhomogenen Kette erst bei größeren N_S zutrifft.

Wir wissen nun, dass die Wärmemaschine mit der inhomogenen Kette als Streuregion am besten arbeitet, wenn $N_S \gg 1$ und t_S möglichst groß gewählt wird, da in diesem Grenzfall die Transmissionsfunktion die Stufenfunktion darstellt, welche wir bereits in Abschnitt 5.2 diskutiert hatten. Des Weiteren haben wir bereits in Abschnitt 5.1.1 festgestellt, dass die Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen mit $\gamma \approx k_B T$ die höchste Leistung erreicht.

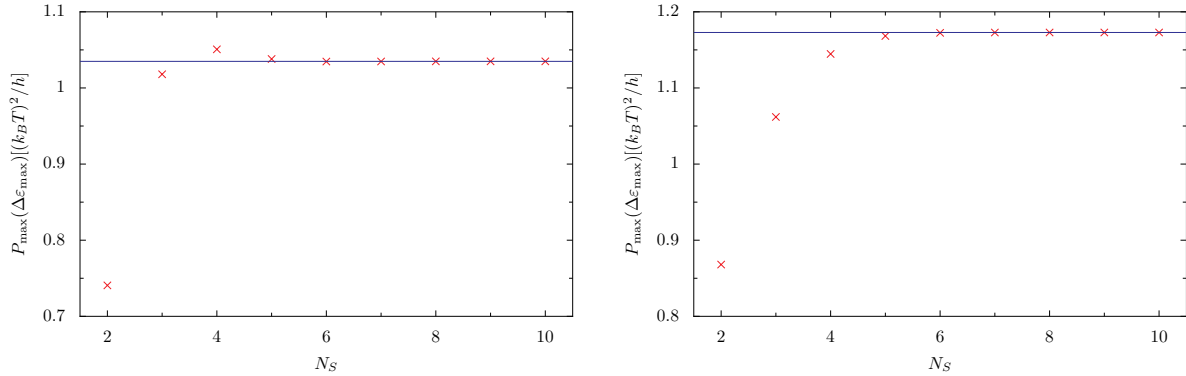


Abbildung 5.21: Das Maximum der Leistung P_{\max} bezüglich der Potentialdifferenz $\Delta\epsilon$ der inkohärenten Wärmemaschine mit der homogenen Kette (links) und dem homogenen Ring (rechts) als Streuregion, aufgetragen auf verschiedene Werte von N_S . Hier wurden zudem die Parameter $\Delta T/T = 1$ und $t_S = 1.5k_B T$ verwendet. Die Linien sind die maximalen Leistungen der Wärmemaschine, berechnet mit den mittleren Transmissionen $\bar{T}(E)$ aus Gl. (5.66) und Gl. (5.83).

Was sind aber die besten Parameter für die homogene Kette und den homogenen Ring? Die Transmissionsfunktionen nehmen im Grenzfall $N_S \gg 1$ beide ovale Formen an (s. Gl. (5.66) und Gl. (5.83)). Deshalb ist hier $t_S \rightarrow \infty$ nicht die optimale Wahl, da bei der Berechnung des Ladungsstroms (Integral in der Landauer-Büttiker-Formel) das Maximum der Differenz der Fermi-Verteilungen nicht mehr optimal ausgenutzt wird. Der optimale Wert des Hoppingparameters t_S für die Wärmemaschine sollte also endlich sein.

In Abb. 5.21 betrachten wir zunächst die homogene Kette (links) und den homogenen Ring (rechts) als Streuregion zwischen den Zuleitungen der inkohärenten Wärmemaschine mit verschiedenen Werten von N_S . Hier ist jeder Punkt das Maximum der Leistungskurve $P_{\max}(\Delta\epsilon_{\max})$ bezüglich $\Delta\epsilon$, wobei hier wieder die Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$ und der Hoppingparameter $t_S = 1.5k_B T$ verwendet wurden. Zudem betrachten wir das System im Grenzfall $t_0 \gg t_S$ mit $\alpha = 1$ (homogene Kette) und $\alpha = 2$ (homogener Ring).

Die Linien stellen die Mittelwerte der Transmissionen $\bar{T}(E)$ aus Gl. (5.66) und Gl. (5.83) mit $N_S \gg 1$ und $t_S = 1.5k_B T$ dar. Bei der Wärmemaschine mit dem homogenen Ring als Streuregion nähern sich die Werte der Leistung bei steigenden N_S an die Leistung der mittleren Transmission $\bar{T}(E)$ von unten her an. Ab $N_S \geq 6$ sind die Werte der Leistung nahezu identisch.

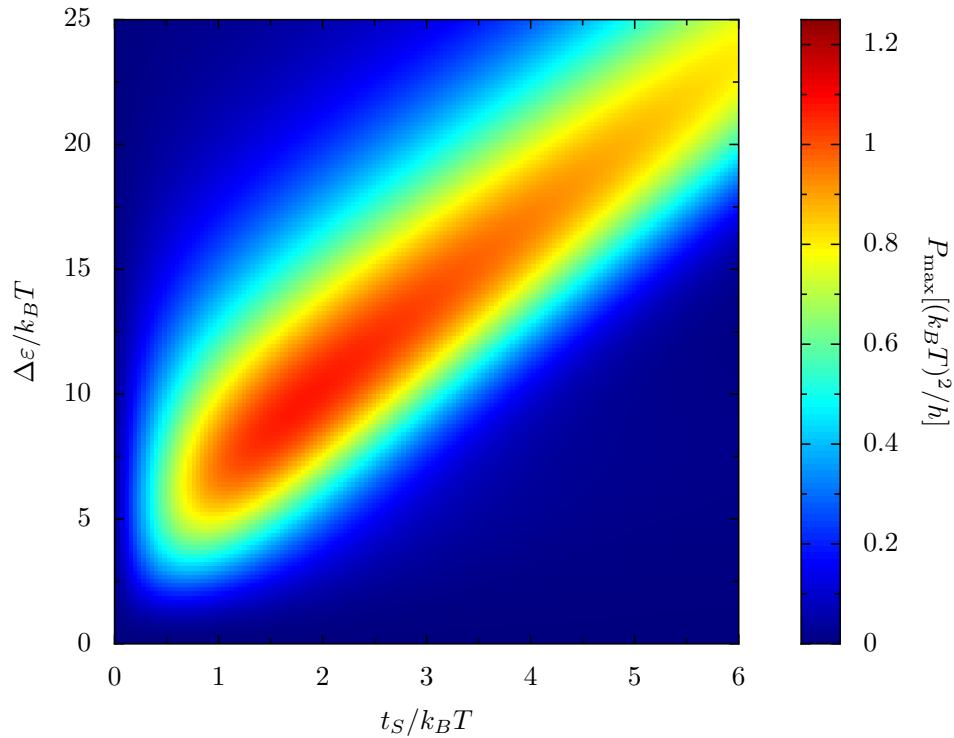


Abbildung 5.22: Die Leistung der inkohärenten Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion, aufgetragen auf t_S und $\Delta\varepsilon$ mit $N_S = 4$ und $\Delta T/T = 1$.

Bei der Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion erhalten wir mit $N_S = 4$ ein Maximum in der Leistung und bei höheren Werten von N_S nähern sich die Werte der Leistung von oben an die Leistung mit der mittleren Transmission $\bar{T}(E)$ an. Die höchste Leistung für die inkohärente Wärmemaschine erhält man also mit der inhomogenen Kette als Streuregion mit $N_S = 4$ und bei dem homogenen Ring als Streuregion bei möglichst hohen Werten von N_S , wobei ab $N_S = 6$ sich die maximale Leistung nur noch minimal verändert.

In Abb. 5.22 betrachten wir die Leistung der inkohärenten Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion mit $N_S = 4$ und $\Delta T/T = 1$ für verschiedene Werte von t_S und $\Delta\varepsilon$. Wie wir bereits vermutet hatten, erhalten wir die maximale Leistung dieser Wärmemaschine mit einem endlichen Wert von t_S . Die maximale Leistung der inkohärenten Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion ist dann $P_{\max} \approx 1.06(k_B T)^2/h$ mit den Parametern $t_S \approx 1.81k_B T$ und $\Delta\varepsilon \approx 9.73k_B T$. Der zur Leistung zugehörige Wirkungsgrad liegt bei $\eta/\eta_C \approx 0.44$.

In Abb. 5.23 betrachten wir die inkohärente Wärmemaschine mit dem homogenen Ring als Streuregion mit $N_S = 10$ und $\Delta T/T = 1$ für verschiedene Werte von $\Delta\varepsilon$ und t_S . Analog zur homogenen Kette erhalten wir auch hier die maximale Leistung bei einem endlichen Wert des Hoppingparameters t_S . Diese liegt bei $P_{\max} \approx 1.19(k_B T)^2/h$ mit den Parame-

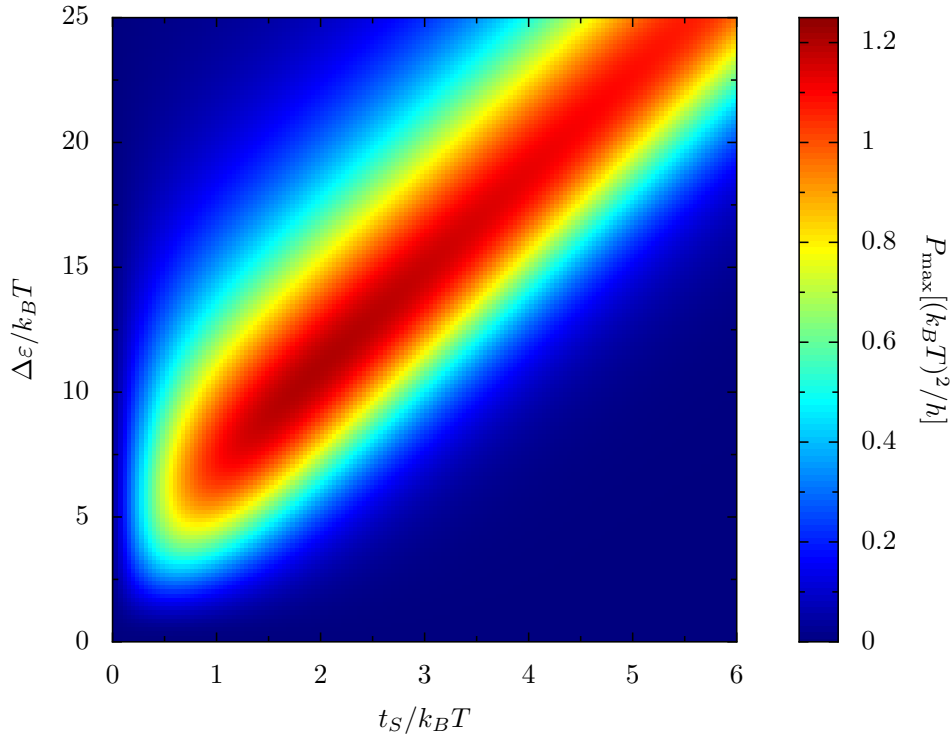


Abbildung 5.23: Homogener Ring als Streuregion der inkohärenten Wärmemaschine mit $N_S = 10$ und $\Delta T/T = 1$, aufgetragen auf t_S und $\Delta\epsilon$.

tern $t_S \approx 1.93k_B T$ und $\Delta\epsilon \approx 10.74k_B T$. Der zugehörige Wirkungsgrad liegt bei $\eta/\eta_C \approx 0.45$.

Im nächsten Abschnitt betrachten wir die inkohärente Wärmemaschine mit einer zwei- und dreidimensionalen Streuregion.

5.5 Die Wärmemaschine mit zwei- und dreidimensionalen Streuregionen

Zunächst gehen wir auf die inkohärente Wärmemaschine mit einer dreidimensionalen Streuregion ein. Diese soll eine primitiv kubische Struktur besitzen. Der Aufbau der Wärmemaschine besteht also aus vielen übereinanderliegenden Schichten des in Abb. 5.24 gezeigten zweidimensionalen Systems. Die direkt übereinanderliegenden Gitterplätze in z -Richtung sind dann mit den Hoppingparametern t_0^z in den Zuleitungen und t_S^z in der Streuregion verbunden.

Da wir in diesem Modell annehmen, dass die Anzahl der Gitterplätze in y -Richtung (und auch in z -Richtung) in den Zuleitungen und in der Streuregion mit N_y (und N_z) gleich sind, kann mit

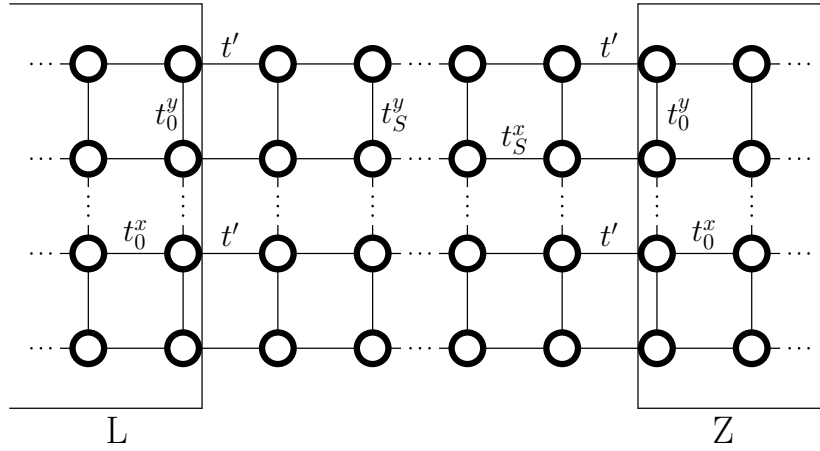


Abbildung 5.24: Inkohärente Nanowärmemaschine mit einer zweidimensionalen Streu-region und den Zuleitungen L und Z .

Hilfe einer Basistransformation das System in $N_y \times N_z$ eindimensionale Untersysteme unterteilt werden. Die gesamte Transmission der Streuregion ist dann

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_z=1}^{N_z} \left| \frac{\alpha \sin k_x \sin q_x}{\sin[(N_x + 1)q_x]e^{-ik_x} - 2\alpha \sin N_x q_x + \alpha^2 \sin[(N_x - 1)q_x]e^{ik_x}} \right|, \quad (5.94)$$

wobei hier $\alpha = t'^2 / t_0^x t_S^x$ ist und die Wellenzahlen mit

$$\begin{aligned} k_x &= \arccos \left(-\frac{E - E_0^y - E_0^z}{2t_0^x} \right) \\ q_x &= \arccos \left(-\frac{E - E_S^y - E_S^z - \varepsilon_S}{2t_S^x} \right) \end{aligned} \quad (5.95)$$

gegeben sind. Die Energien in y - und z -Richtung sind $E_i^j = -2t_i^j \cos \frac{n_j \pi}{N_j + 1}$ (feste Randbedingungen), mit $i = 0, S$ und $j = y, z$, wobei $n_j = 1, 2, \dots, N_j$ ist. Die Herleitung der Transmission aus Gl. (5.94) ist im Anhang A.2 zu finden. Die Transmission des zweidimensionalen Systems aus Abb. 5.24 erhält man, indem man $N_z = 1$ wählt. Damit wird lediglich über n_y summiert und die Energien in z -Richtung sind $E_0^z = 0$.

Da die oben betrachteten zwei- und dreidimensionalen Systeme in eindimensionale Untersysteme aufgeteilt wurden, kann der Ladungs- und der Wärmestrom jedes Untersystems mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus aus Abschnitt 2.4 berechnet werden. Die gesamten Ströme erhalten wir, indem die jeweiligen Ströme der Untersysteme aufaddiert werden.

In Abb. 5.25 sind die Transmissionen für das ein-, zwei- und dreidimensionale System im Grenzfall $t_0^x \gg t_S^x$ zu sehen. Hier wurden die Parameter für die drei Systeme mit $\alpha = 1$ und $N_S^x = 4$ gewählt. Des Weiteren wurden für das zweidimensionale System die Parameter

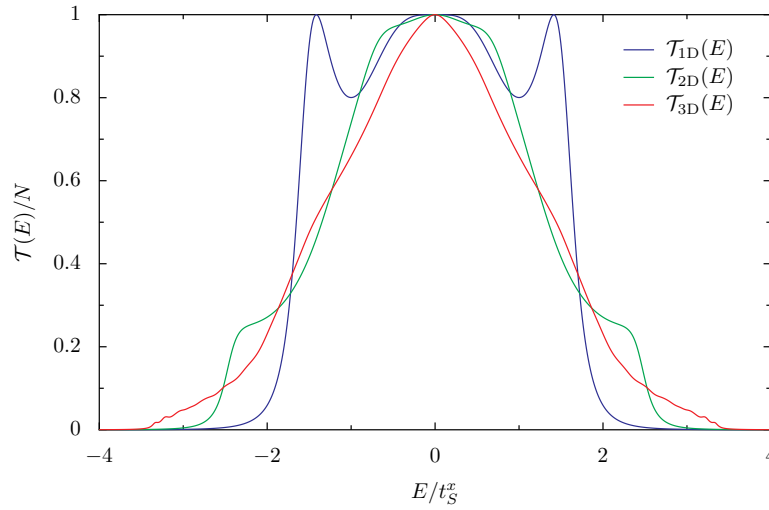


Abbildung 5.25: Transmission der ein-, zwei- und dreidimensionalen inkohärenten Wärmemaschine im Grenzfall $t_0^x \gg t_S^x$. Für die drei Systeme wurden die Parameter $\alpha = 1$ und $N_S^x = 4$ gewählt. Zudem wurde für das zweidimensionale System $t_0^y = 0.5t_0^x$, $t_S^y = 0.5t_S^x$ und $N = N_y = 100$ verwendet und für das dreidimensionale System wurden zusätzlich die Parameter $t_0^z = 0.5t_0^x$, $t_S^z = 0.5t_S^x$ und $N = N_y N_z = 100$ mit $N_y = N_z = 10$ gewählt.

$N_y = 100$, $t_S^y = 0.5t_S^x$ und $t_0^y = 0.5t_0^x$ verwendet und für das dreidimensionale System wurden zusätzlich die Parameter $N_y = N_z = 10$, $t_S^z = 0.5t_S^x$ und $t_0^z = 0.5t_0^x$ gewählt. Damit die Transmissionen in den verschiedenen Dimensionen vergleichbar sind, betrachten wir bei dem zweidimensionalen System den Quotient $\mathcal{T}(E)/N$ mit $N = N_y$ und bei den dreidimensionalen Systemen den Quotient $\mathcal{T}(E)/N$ mit $N = N_y N_z$.

Man kann in Abb. 5.25 erkennen, dass die Transmissionsfunktionen der zwei- und dreidimensionalen Systeme nicht mehr an die annähernd rechteckige Form der Transmissionsfunktion des eindimensionalen Systems herankommen und eher eine dreieckige Form besitzen. Zudem kann man erkennen, dass die Transmission des zweidimensionalen Systems die bessere Filterfunktion (also besser geeignet für die Wärmemaschine) besitzt als die Transmission des dreidimensionalen Systems. Trotzdem fällt die Transmissionsfunktion des dreidimensionalen Systems schneller ab als die Lorentz-Verteilung und sollte deshalb eine höhere Leistung erzielen als die inkohärente Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten als Verbindung zwischen den Zuleitungen.

In Abb. 5.26 sind die maximalen Leistungen und deren zugehörigen Wirkungsgrade der inkohärenten Wärmemaschinen mit Streuregionen in verschiedenen Dimensionen zu sehen. Für das ein-, zwei- und dreidimensionale System wurden die gleichen Parameter wie für die Transmissionen aus Abb. 5.25 bei der Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$ verwendet. Zudem ist die maximale Leistung und der zugehörige Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten als Verbindungen zwischen den Zuleitungen mit $\gamma = k_B T$

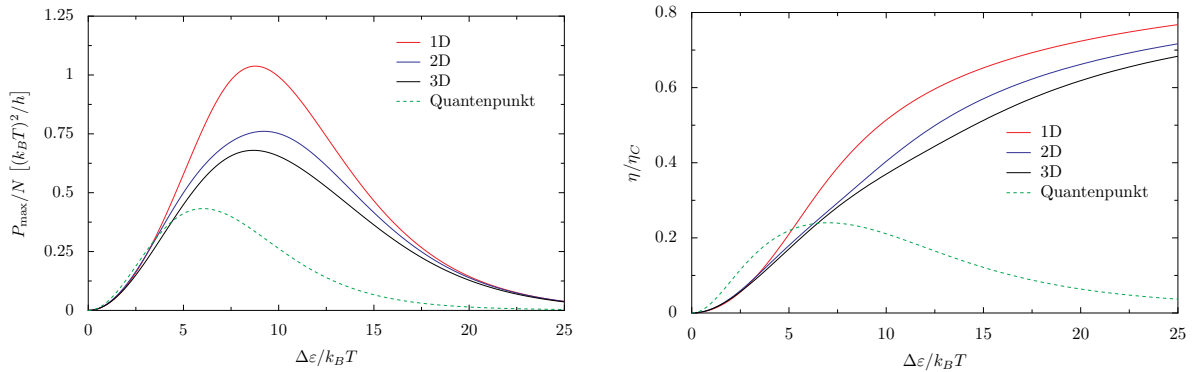


Abbildung 5.26: Maximale Leistung und der zugehörige Wirkungsgrad der inkohärenten Wärmemaschine für die ein-, zwei- und dreidimensionale inkohärente Wärmemaschine. Es wurden die gleichen Parameter wie bei den Transmissionen aus Abb. 5.25 mit der Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$ verwendet. Zusätzlich ist die maximale Leistung und der zugehörige Wirkungsgrad der Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen mit $\gamma = k_B T$ abgebildet.

abgebildet (gestrichelte Linien).

Man kann erkennen, dass die Maxima der normierten Leistungen der zwei- und dreidimensionalen Wärmemaschine niedriger liegen als beim eindimensionalen System. Dennoch liegen sowohl die Maxima der Leistungen, als auch die Werte der zugehörigen Wirkungsgrade der zwei- und dreidimensionalen Wärmemaschine deutlich höher als bei der Wärmemaschine mit den einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen, was wir bereits bei der Betrachtung der Transmissionsfunktionen (s. Abb. 5.25) vermutet hatten.

6 Was wurde gemacht und wie geht's weiter?

In dieser Arbeit wurde der thermoelektrische Transport durch Nanostrukturen behandelt. Dazu betrachteten wir Systeme, die aus zwei oder drei Zuleitungen bestehen, welche durch eine Streuregion verbunden sind. Die Zuleitungen werden als Teilchen- und Wärmebäder betrachtet, um so Temperaturdifferenzen und Spannungen zwischen diesen Zuleitungen anlegen zu können, welche dann einen Ladungs-, Energie- und Wärmestrom durch die Streuregion zur Folge haben. Ziel dieser Arbeit war es, diese Ströme durch wechselwirkende und wechselwirkungsfreie Streuregionen zu berechnen und mit Hilfe dieser Ergebnisse zu untersuchen, ob und wie sich Nanowärmemaschinen hinsichtlich ihrer Effizienz optimieren lassen.

Was wurde gemacht?

Die Arbeit ist in drei Hauptgebiete unterteilt, auf die wir im Folgenden noch einmal kurz eingehen.

Das Tight-Binding-Modell

Als erstes betrachteten wir wechselwirkungsfreie Systeme im Tight-Binding-Modell. Hier gingen wir auf zwei verschiedene Methoden ein, um die Ströme durch eine Streuregion zu berechnen. Zunächst verwendeten wir die Zeitentwicklung des quantenmechanischen Dichteoperators und betrachteten die Ströme als Funktion der Zeit. Die Ströme bilden hier Plateaus aus, wobei wir diese zeitlich konstanten Werte als stationäre Ströme bezeichnet hatten. Als zweite Methode verwendeten wir zur Berechnung der stationären Ströme den Landauer-Büttiker-Formalismus, welcher von den Fermi-Verteilungen der Zuleitungen und der Transmission der Streuregion abhängt. Vergleicht man die stationären Ströme beider Methoden, fanden wir heraus, dass diese identisch sind.

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen

Als nächstes betrachteten wir die Wechselwirkung der Elektronen in der Streuregion. Hier verwendeten wir die Hartree-Fock-Näherung, um die Wechselwirkung mit den Methoden aus Kapitel 2 behandeln zu können. Die mit der Hartree-Fock-Näherung berechneten Ströme verglichen wir mit exakt berechneten Strömen, die wir für kleine Systeme mit Hilfe der

Hubbard-Stratonovich-Transformation berechneten oder aus der Literatur (z.B. [52,56]) erhielten. Da die Ströme durch wechselwirkende Streuregionen nur in wenigen Spezialfällen analytisch exakt berechnet und in den meisten Fällen nur mit sehr zeitintensiven numerischen Berechnungen behandelt werden können, bietet die Hartree-Fock-Näherung eine zeitsparende Alternative, um qualitativ die Auswirkungen der Wechselwirkung der Elektronen auf den thermoelektrischen Transport beobachten zu können. Nur bei starken Wechselwirkungen und großen Spannungen wichen die Ströme, welche mit der Hartree-Fock-Näherung berechnet wurden (teils stark) von den exakt berechneten Strömen ab.

Die Nanowärmemaschine

Im letzten Teil der Arbeit befassten wir uns mit der Funktionsweise einer von Jordan *et al.* [21] vorgeschlagenen Nanowärmemaschine, welche aus zwei Zuleitungen mit tieferer Temperatur und einem Reservoir mit höherer Temperatur besteht (s. Abb. 5.1). Die Zuleitungen sind jeweils mit einem einzelnen Quantenpunkt mit dem Reservoir verbunden. Diese Wärmemaschine liefert bereits eine hohe Leistung bei einem hohen Wirkungsgrad, verglichen mit Nanowärmemaschinen mit einem anderen Aufbau (s. Abschnitt 5.1.2). Trotzdem konnten wir die Wärmemaschine mit speziellen Streuregionen weiter optimieren. Dazu betrachteten wir die homogene Kette und die inhomogene Kette mit speziell gewählten Hoppingparametern und auch den homogenen Ring als Streuregion. Bei den drei betrachteten Strukturen konnten wir jeweils die Transmissionsfunktion analytisch berechnen. Wärmemaschinen mit diesen speziellen Streuregionen liefern in etwa die doppelte Leistung und erzielen auch einen doppelt so hohen Wirkungsgrad bei maximaler Leistung wie die Wärmemaschine aus [21].

Wie geht's weiter?

Bei der Nanowärmemaschine hatten wir in der Arbeit erwähnt, dass diese sehr gute Leistungen und Wirkungsgrade erzielen kann. Bei maximaler Leistung der Wärmemaschine erhielten wir einen Wirkungsgrad, welcher bei 45% des maximal erreichbaren Wirkungsgrads (Carnot-Wirkungsgrad) liegt.

Wie können wir aber die Leistung der Wärmemaschine beurteilen?

Die Leistung der Nanowärmemaschine

Dazu schätzen wir ab, wie viel Watt eine einzelne Nanowärmemaschine mit einer eindimensionalen Streuregion liefern kann und wie viele Wärmemaschinen parallel geschaltet werden müssen, damit eine 100 W Glühbirne zum Leuchten gebracht werden kann.

Die Leistung der optimierten Nanowärmemaschine aus Abschnitt 5.4 hatte das Maximum bei ungefähr $P_{\max} \approx (k_B T)^2 / h$. Wir nehmen nun für die tiefe Temperatur $T_K = 300$ K (ungefähr

Raumtemperatur) und für die hohe Temperatur $T_H = 900$ K an. Damit erhalten wir mit der mittleren Temperatur $T = 600$ K die Temperaturdifferenz $\Delta T/T = 1$, welche wir auch in der Arbeit betrachtet hatten. Mit den Konstanten $k_B \approx 1.4 \cdot 10^{-23}$ J/K und $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$ Js erhalten wir dann

$$P_{\max} \approx 10^{-7} \text{ W} \quad (6.1)$$

für die Leistung. Wir benötigen also eine Milliarde parallel geschalteter Wärmemaschinen, um eine 100 W Glühbirne zum Leuchten zu bringen.

Um dies technisch realisieren zu können, betrachteten wir in Abschnitt 5.5 inkohärente Wärmemaschinen mit einer zwei- oder dreidimensionalen Streuregion. Hier fanden wir heraus, dass die zwei- und dreidimensionalen Systeme Leistungen und Wirkungsgrade erzielen, welche nicht wesentlich kleiner sind als die Leistung und der Wirkungsgrad der Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion.

Die Idee, viele Wärmemaschinen parallel zu schalten, um so mehr Leistung zu erhalten, ist nicht neu. Bereits in der Publikation von Sothmann *et al.* [77] wurde das „Schweizer-Käse-Sandwich“ (s. Abb. 5.5) vorgeschlagen, bei dem viele inkohärente Wärmemaschinen mit einzelnen Quantenpunkten als Streuregion parallel geschaltet werden. Wir hatten in dieser Arbeit aber bereits diskutiert, dass die technische Realisierung der inkohärenten Wärmemaschine schwer ist, da die beiden Streuregionen räumlich sehr weit voneinander entfernt liegen müssen. Dadurch erhalten wir ein Schichtsystem bei dem das mittlere Reservoir erhitzt und die äußeren Zuleitungen abgekühlt werden. Bei solch einem System stellt sich jedoch die Frage, ob der Großteil der Wärme nicht über Phononen von dem heißen Reservoir in die kalten Zuleitungen fließt.

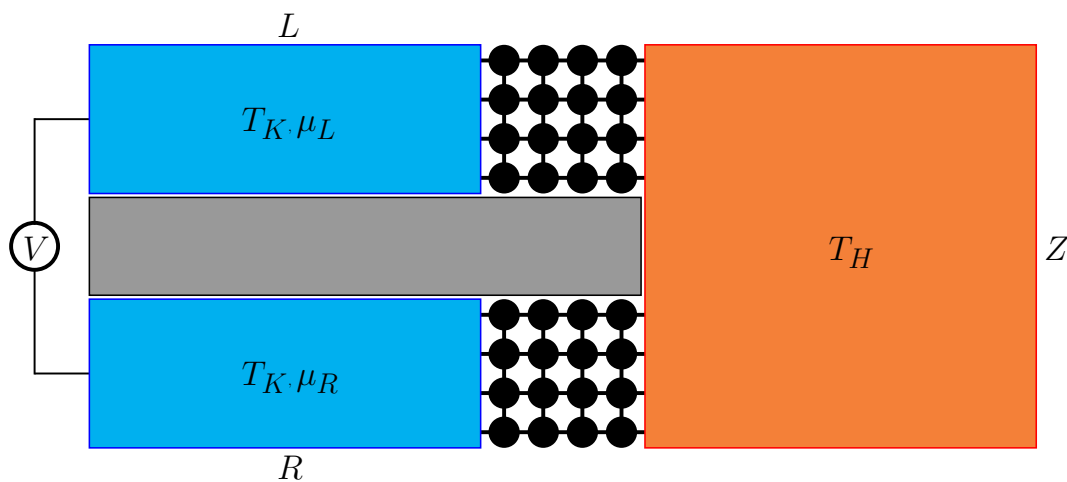


Abbildung 6.1: Aufbau der kohärenten Wärmemaschine mit zweidimensionalen Streuregionen, wobei der graue Bereich hier eine isolierende Schicht darstellt. Die blauen Bereiche sind die Zuleitungen mit den tiefen Temperaturen, der rote Bereich ist das Reservoir mit der hohen Temperatur. Die schwarzen Kreise sind die Quantenpunkte, welche die beiden Streuregionen zwischen den Zuleitungen bilden.

Ein Vorschlag, wie eine zweidimensionale Wärmemaschine umgesetzt werden könnte, ist die kohärente Wärmemaschine, welche in Abb. 6.1 zu sehen ist. Die blauen Bereiche stellen hier die Zuleitungen mit den tieferen Temperaturen dar, der rote Bereich ist das Reservoir mit der hohen Temperatur. Zudem ist der graue Balken eine isolierende Schicht. Die schwarzen Kreise sind die Quantenpunkte, welche die beiden Streuregionen bilden.

Die Transmissionsfunktion der kohärenten Wärmemaschine lässt sich berechnen, indem wir die Basistransformation verwenden, welche wir bereits bei der Berechnung der Transmission der inkohärenten Wärmemaschine in Anhang A.2 benutzt hatten. Das System aus Abb. 6.1 lässt sich dann durch viele Untersysteme beschreiben, welche die Struktur der kohärenten Wärmemaschine aus Abb. 5.8 besitzen. Der Vorteil der kohärenten Wärmemaschine liegt darin, dass die ganze linke Seite abgekühlt und die ganze rechte Seite erhitzt wird und es kein Schichtsystem wie bei der inkohärenten Wärmemaschine ist, bei dem die mittlere Schicht erhitzt werden muss.

Die kohärente Wärmemaschine ist in Abb. 6.1 als zweidimensionales System abgebildet. Wenn allerdings viele dieser zweidimensionalen Systeme übereinander geschichtet werden, erhält man eine dreidimensionale Wärmemaschine.

Erste Berechnungen weisen darauf hin, dass die inkohärente und kohärente Wärmemaschine (s. Abb. 5.24 und Abb. 6.1) nahezu die gleichen Leistungen und Wirkungsgrade liefern. Dieses Phänomen konnten wir bereits in Abschnitt 5.1.3 für Wärmemaschinen mit einzelnen Quantenpunkten zwischen den Zuleitungen bestätigen.

Fazit

Nanowärmemaschinen mit speziell konfigurierten Systemen aus Quantenpunkten als Streuregion liefern sehr gute Leistungen und auch sehr hohe Werte für den Wirkungsgrad. Dies gilt sogar für Wärmemaschinen mit zwei- und dreidimensionalen Streuregionen.

Wie bekommt man aber nun theoretisch die 100 W Glühbirne zum Leuchten?

Um eine 100 W Glühbirne zum Leuchten zu bringen, verwenden wir die kohärente Wärmemaschine mit den dreidimensionalen Streuregionen, da diese den Vorteil hat, dass viele Wärmemaschinen auf kleinem Raum parallel geschaltet werden können, aber sich die Leistung und der zugehörige Wirkungsgrad im Gegensatz zur Wärmemaschine mit der homogenen Kette als Streuregion nicht stark verringert (s. Abb. 5.26).

Welche Ausmaße hat die Streuregion der Wärmemaschine?

Damit die kohärente Wärmemaschine 100 W liefern kann, ist die Anzahl der Quantenpunkte in der Streuregion in y - und z -Richtung mit $N_y = N_z \approx 40\,000$ gegeben. Gehen wir davon

aus, dass ein Quantenpunkt eine Fläche von $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$ besitzt [87], hat eine Streuregion die Fläche (y - und z -Richtung) von ca. $4\text{cm} \times 4\text{cm}$.

Bei diesen Überlegungen ist natürlich zu bedenken, dass es sich hierbei um rein theoretische Abschätzungen handelt, ohne auf die Schwierigkeiten einzugehen, die bei der konkreten technischen Realisierung auftreten können.

Anhang

A.1 Berechnung der Koeffizienten a_j der inhomogenen Kette

In diesem Abschnitt berechnen wir die optimierten Hoppingparameter der inhomogenen Kette mit vier Gitterplätzen (s. Abb. A.1). Wir gehen von einer symmetrischen Lösung mit

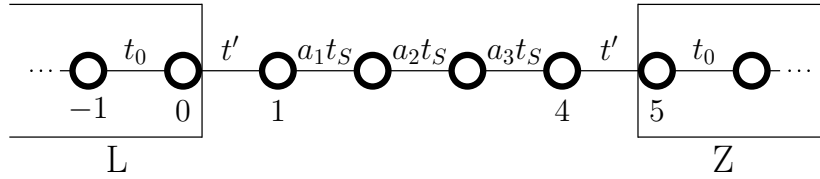


Abbildung A.1: Inhomogene Kette mit vier Gitterplätzen, angebunden an zwei Zuleitungen.

$a_1 = a_3$ aus und betrachten das System im Grenzfall $t_0 \gg t_S$. Damit erhalten wir aus der Schrödingergleichung folgendes Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} it_0 & t' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t' & E & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1 & E & t_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_2 & E & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_1 & E & t' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t' & it_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} it_0 \\ -t' \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

wobei $t_j = a_j t_S$ mit $j = 1, 2$ ist. Die Transmissionsfunktion wird mit $\mathcal{T}(E) = |C|^2$ berechnet. Mit $\alpha = t'^2/t_0 t_S = 1$ erhalten wir dann

$$\mathcal{T}(E) = \left| \frac{2a_1^2 a_2 t_S^4}{E^4 - E^2(1 + 2a_1^2 + a_2^2)t_S^2 + (a_1^4 + a_2^2)t_S^4 + i[2E^3 t_S - E(2a_1^2 + 2a_2^2)t_S^3]} \right|^2. \quad (\text{A.2})$$

Als nächstes berechnen wir das Betragsquadrat und erhalten für den Zähler der Transmissionsfunktion

$$\mathcal{T}_1(E) = 4a_1^4 a_2^2 \quad (\text{A.3})$$

und für den Nenner

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_2(E) = E^8/t_S^8 - 2(2a_1^2 + a_2^2 - 1)E^6/t_S^6 + (1 + 6a_1^4 - 4a_2^2 + a_2^4 - 4a_1^2 + 4a_1^2a_2^2)E^4/t_S^4 \\ - 2(2a_1^6 + a_2^2 - 2a_1^2a_2^2 - a_2^4 - a_1^4 + a_1^4a_2^2)E^2/t_S^2 + (a_1^4 + a_2^2)^2, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

wobei $\mathcal{T}(E) = \mathcal{T}_1(E)/\mathcal{T}_2(E)$.

Um nun die Transmissionsfunktion der Form

$$\mathcal{T}(E) = \left(1 + \frac{E^8}{4a_1^4a_2^2t_S^8}\right)^{-1} \quad (\text{A.5})$$

zu erhalten, muss das folgende überbestimmte nichtlineare Gleichungssystem gelöst werden:

$$(a_1^4 + a_2^2)^2 = 4a_1^4a_2^2 \quad (\text{A.6})$$

$$2a_1^6 + a_2^2 - 2a_1^2a_2^2 - a_2^4 - a_1^4 + a_1^4a_2^2 = 0 \quad (\text{A.7})$$

$$1 + 6a_1^4 - 4a_2^2 + a_2^4 - 4a_1^2 + 4a_1^2a_2^2 = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$2a_1^2 + a_2^2 - 1 = 0. \quad (\text{A.9})$$

Das Gleichungssystem lässt sich lösen, indem wir zunächst Gl. (A.6) nach a_2 auflösen. Damit ist der Zusammenhang zwischen den Parametern a_1 und a_2 durch

$$a_2 = a_1^2 \quad (\text{A.10})$$

gegeben. Anschließend setzen wir den Parameter a_2 in die Gl. (A.9) ein, und erhalten mit Gl. (A.10)

$$\begin{aligned} a_1 &= \sqrt{\sqrt{2} - 1} \\ a_2 &= \sqrt{2} - 1. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

a_1 und a_2 aus Gl. (A.11) werden zur Kontrolle in die Gl. (A.7) und (A.8) eingesetzt.

Betrachtet man das Gleichungssystem aus Gl. (A.6) bis Gl. (A.9) kann man erkennen, dass die Gleichungssysteme bei steigender Anzahl von Gitterplätzen schnell sehr unübersichtlich werden, weswegen die analytische Bestimmung der Parameter a_j lediglich bis $N_S = 7$ Gitterplätze möglich ist.

Wir konnten bisher numerisch nachweisen, dass für eine inhomogene Kette bis zu $N_S = 13$ Gitterplätzen reelle und positive a_j existieren, welche die Transmissionsfunktion aus Gl. (5.93) zur Folge haben. Diese reellen und positiven Parameter a_j sind eindeutig und symmetrisch (z.B. im Fall $N_S = 4$ gilt $a_1 = a_3$).

A.2 Transmission eines dreidimensionalen Systems

In diesem Abschnitt berechnen wir die Transmission durch eine primitiv kubische Streuregion. In Abb. A.2 ist das System in zwei Dimensionen abgebildet. Das dreidimensionale System erhält man, indem man viele dieser zweidimensionalen Systeme übereinander schichtet. Dabei sind dann die Hoppingparameter in z-Richtung durch t_0^z in den Zuleitungen und t_S^z in der Streuregion gegeben.

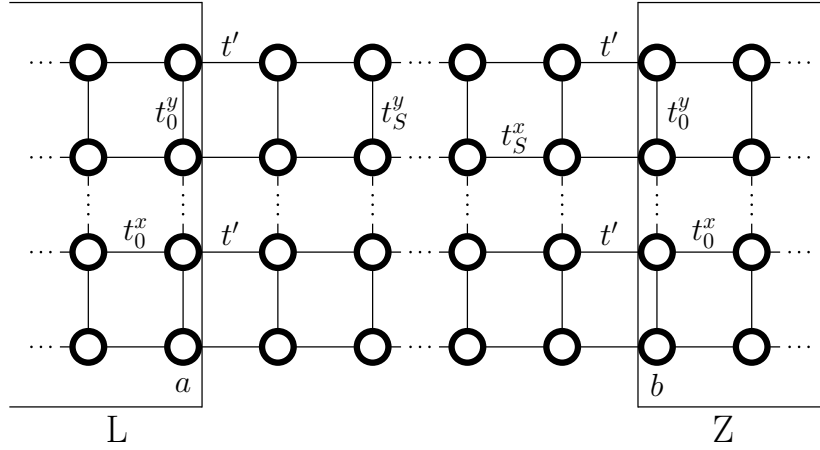


Abbildung A.2: Zweidimensionales System mit zwei Zuleitungen. Die Anzahl der Gitterplätze N_y in y -Richtung ist sowohl in den Zuleitungen als auch in der Streuregion gleich gewählt.

Der Hamiltonoperator setzt sich dann aus der linken Zuleitung

$$\hat{H}_L = \sum_{l_x=1}^{a-1} \sum_{l_y=1}^{N_y-1} \sum_{l_z=1}^{N_z-1} \left[-t_0^x \left(\hat{c}_{l_x+1,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) - t_0^y \left(\hat{c}_{l_x,l_y+1,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) - t_0^z \left(\hat{c}_{l_x,l_y,l_z+1}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) \right], \quad (\text{A.12})$$

aus der zentralen Zuleitung

$$\hat{H}_Z = \sum_{l_x=b}^{N_x-1} \sum_{l_y=1}^{N_y-1} \sum_{l_z=1}^{N_z-1} \left[-t_0^x \left(\hat{c}_{l_x+1,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) - t_0^y \left(\hat{c}_{l_x,l_y+1,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) - t_0^z \left(\hat{c}_{l_x,l_y,l_z+1}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) \right], \quad (\text{A.13})$$

der Streuregion

$$\begin{aligned} \hat{H}_S = \sum_{l_x=a+1}^{b-2} \sum_{l_y=1}^{N_y-1} \sum_{l_z=1}^{N_z-1} & \left[-t_S^x \left(\hat{c}_{l_x+1,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) - t_S^y \left(\hat{c}_{l_x,l_y+1,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & \left. - t_S^z \left(\hat{c}_{l_x,l_y,l_z+1}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) \right] + \varepsilon_S \sum_{l_x=a+1}^{b-1} \sum_{l_y=1}^{N_y} \sum_{l_z=1}^{N_z} \hat{c}_{l_x,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{l_x,l_y,l_z} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

und den Verbindungen

$$\hat{H}_{LS,SZ} = -t' \sum_{l_y=1}^{N_y} \sum_{l_z=1}^{N_z} \left(\hat{c}_{a+1,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{a,l_y,l_z} + \hat{c}_{b,l_y,l_z}^\dagger \hat{c}_{b-1,l_y,l_z} + \text{h.c.} \right) \quad (\text{A.15})$$

zusammen. Hier sind N_x , N_y und N_z die Anzahl der Gitterplätze in der x -, y - und z -Richtung. Damit die Energiebänder in den Zuleitungen die gleichen sind, haben die Zuleitungen L und Z die gleiche Anzahl an Gitterplätzen in x -Richtung (es gilt $a = N_x - b - 1$).

Der gesamte Hamiltonoperator ist dann

$$\hat{H}_{\text{ges}} = \hat{H}_L + \hat{H}_Z + \hat{H}_S + \hat{H}_{LS,SZ}. \quad (\text{A.16})$$

Die Eigenenergien der isolierten Zuleitungen sind

$$E = -2t_0^x \cos k_x - 2t_0^y \cos k_y - 2t_0^z \cos k_z \quad (\text{A.17})$$

und der isolierten Streuregion

$$E = -2t_S^x \cos q_x - 2t_S^y \cos q_y - 2t_S^z \cos q_z. \quad (\text{A.18})$$

Da das System in y - und z -Richtung mit festen Randbedingungen beschrieben werden kann, erhalten wir mit den Wellenzahlen

$$\begin{aligned} k_y = q_y &= \frac{n_y \pi}{N_y + 1} & n_y &= 1, 2, \dots, N_y \\ k_z = q_z &= \frac{n_z \pi}{N_z + 1} & n_z &= 1, 2, \dots, N_z \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

die Eigenenergien

$$E = -2t_0^x \cos k_x + E_0^y + E_0^z \quad (\text{A.20})$$

und

$$E - \varepsilon_S = -2t_S^x \cos q_x + E_S^y + E_S^z, \quad (\text{A.21})$$

wobei $E_i^j = -2t_i^j \cos \frac{n_j \pi}{N_j + 1}$ mit $i = 0, S$ und $j = y, z$ gegeben ist.

Mit einer Basistransformation lässt sich der Hamiltonoperator \hat{H}_{ges} in y - und z -Richtung

diagonalisieren [88,89]. Dazu verwenden wir für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\begin{aligned}\hat{c}_{l_x, l_y, l_z} &= \sqrt{\frac{2}{N_y + 1}} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sin\left(\frac{l_y \pi}{N_y + 1} n_y\right) \hat{c}_{l_x, n_y, l_z} \\ \hat{c}_{l_x, l_y, l_z}^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{N_y + 1}} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sin\left(\frac{l_y \pi}{N_y + 1} n_y\right) \hat{c}_{l_x, n_y, l_z}^\dagger\end{aligned}\quad (\text{A.22})$$

und

$$\begin{aligned}\hat{c}_{l_x, l_y, l_z} &= \sqrt{\frac{2}{N_z + 1}} \sum_{n_z=1}^{N_z} \sin\left(\frac{l_z \pi}{N_z + 1} n_z\right) \hat{c}_{l_x, l_y, n_z} \\ \hat{c}_{l_x, l_y, l_z}^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{N_z + 1}} \sum_{n_z=1}^{N_z} \sin\left(\frac{l_z \pi}{N_z + 1} n_z\right) \hat{c}_{l_x, l_y, n_z}^\dagger\end{aligned}, \quad (\text{A.23})$$

wobei die Sinusfunktionen die Eigenfunktionen der linearen Kette mit festen Randbedingungen darstellen.

Damit erhalten wir $N_y \times N_z$ entkoppelte eindimensionale Untersysteme. Der Hamiltonoperator eines einzelnen Untersystems setzt sich dann einerseits aus den Zuleitungen

$$\hat{H}_L^{n_y, n_z} = -t_0^x \sum_{l_x=1}^{a-1} \left(\hat{c}_{l_x+1, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z} + \text{h.c.} \right) + (E_0^y + E_0^z) \sum_{l_x=1}^a \hat{c}_{l_x, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z} \quad (\text{A.24})$$

und

$$\hat{H}_Z^{n_y, n_z} = -t_0^x \sum_{l_x=b}^{N_x-1} \left(\hat{c}_{l_x+1, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z} + \text{h.c.} \right) + (E_0^y + E_0^z) \sum_{l_x=b}^{N_x} \hat{c}_{l_x, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z}, \quad (\text{A.25})$$

andererseits aus der Streuregion

$$\begin{aligned}\hat{H}_S^{n_y, n_z} &= -t_S^x \sum_{l_x=a+1}^{b-2} \left(\hat{c}_{l_x+1, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z} + \text{h.c.} \right) \\ &\quad + (\varepsilon_S + E_S^y + E_S^z) \sum_{l_x=a+1}^{b-1} \hat{c}_{l_x, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{l_x, n_y, n_z}\end{aligned}\quad (\text{A.26})$$

und den Verbindungen zwischen der Streuregion und den Zuleitungen

$$\hat{H}_{LS, SZ}^{n_y, n_z} = -t' \left(\hat{c}_{a+1, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{a, n_y, n_z} + \hat{c}_{b, n_y, n_z}^\dagger \hat{c}_{b-1, n_y, n_z} + \text{h.c.} \right) \quad (\text{A.27})$$

zusammen. Der gesamte Hamiltonoperator des Untersystems ist dann

$$\hat{H}_{\text{ges}}^{n_y, n_z} = \hat{H}_L^{n_y, n_z} + \hat{H}_Z^{n_y, n_z} + \hat{H}_S^{n_y, n_z} + \hat{H}_{LS, SZ}^{n_y, n_z}. \quad (\text{A.28})$$

Da der Operator $\hat{H}_{\text{ges}}^{n_y, n_z}$ die gleiche Form besitzt wie der Hamiltonoperator der homogenen Kette aus Abschnitt 5.3.1, kann die Transmission durch die Streuregion des Untersystems wie folgt angegeben werden:

$$\mathcal{T}^{n_y, n_z}(E) = \left| \frac{\alpha \sin k_x \sin q_x}{\sin[(N_x + 1)q_x]e^{-ik_x} - 2\alpha \sin N_x q_x + \alpha^2 \sin[(N_x - 1)q_x]e^{ik_x}} \right|, \quad (\text{A.29})$$

wobei $\alpha = t'^2/t_0^x t_S^x$ ist. Die Wellenzahlen sind mit

$$\begin{aligned} k_x &= \arccos \left(-\frac{E - E_0^y - E_0^z}{2t_0^x} \right) \\ q_x &= \arccos \left(-\frac{E - E_S^y - E_S^z - \varepsilon_S}{2t_S^x} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

gegeben und die gesamte Transmission ist dann

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_z=1}^{N_z} \mathcal{T}^{n_y, n_z}(E). \quad (\text{A.31})$$

Für jeden Wert der Energie E werden also die Transmissionen aller eindimensionalen Untersysteme aufaddiert.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Andergassen, V. Meden, H. Schoeller, J. Splettstoesser, and M. R. Wegewijs: *Charge transport through single molecules, quantum dots and quantum wires*, Nanotechnology **21**, 272001 (2010).
- [2] S. Hershfield: *Reformulation of Steady State Nonequilibrium Quantum Statistical Mechanics*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2134 (1993).
- [3] E. Boulat, H. Saleur, and P. Schmitteckert: *Twofold Advance in the Theoretical Understanding of Far-From-Equilibrium Properties of Interacting Nanostructures*, Phys. Rev. Lett. **101**, 140601 (2008).
- [4] P. W. Anderson: *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [5] P. Schmitteckert: *Nonequilibrium electron transport using the density matrix renormalization group method*, Phys. Rev. B **70**, 121302 (2004).
- [6] F. Heidrich-Meisner, A. E. Feiguin, and E. Dagotto: *Real-time simulations of nonequilibrium transport in the single-impurity Anderson model*, Phys. Rev. B **79**, 235336 (2009).
- [7] E. Canovi, A. Moreno, and A. Muramatsu: *Transport through two interacting resonant levels connected by a Fermi sea*, Phys. Rev. B **88**, 245105 (2013).
- [8] Y. Meir and N. S. Wingreen: *Landauer Formula for the Current through an Interacting Electron Region*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [9] A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir: *Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems*, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [10] M. Nuss, M. Ganahl, H. G. Evertz, E. Arrigoni, and W. von der Linden: *Steady-state and quench-dependent relaxation of a quantum dot coupled to one-dimensional leads*, Phys. Rev. B **88**, 045132 (2013).
- [11] M. Einhellinger, A. Cojohovschi, and E. Jeckelmann: *Numerical method for nonlinear steady-state transport in one-dimensional correlated conductors*, Phys. Rev. B **85**, 235141 (2012).
- [12] S. Weiss, J. Eckel, M. Thorwart, and R. Egger: *Iterative real-time path integral approach to nonequilibrium quantum transport*, Phys. Rev. B **77**, 195316 (2008).

- [13] C. Karrasch, S. Andergassen, M. Pletyukhov, D. Schuricht, L. Borda, V. Meden, and H. Schoeller: *Non-equilibrium current and relaxation dynamics of a charge-fluctuating quantum dot*, Europhys. Lett. **90**, 30003 (2010).
- [14] S. Andergassen, M. Pletyukhov, D. Schuricht, H. Schoeller, and L. Borda: *Renormalization group analysis of the interacting resonant-level model at finite bias: Generic analytic study of static properties and quench dynamics*, Phys. Rev. B **83**, 205103 (2011).
- [15] M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, and K. Stokbro: *Density-functional method for nonequilibrium electron transport*, Phys. Rev. B **65**, 165401 (2002).
- [16] S. Schenk, M. Dzierzawa, P. Schwab, and U. Eckern: *Successes and failures of Bethe ansatz density functional theory*, Phys. Rev. B **78**, 165102 (2008).
- [17] M. Dzierzawa, U. Eckern, S. Schenk, and P. Schwab: *Current density functional theory for one-dimensional fermions*, Phys. Status Solidi B **246**, 941 (2009).
- [18] P. Schmitteckert, M. Dzierzawa, and P. Schwab: *Exact time-dependent density functional theory for impurity models*, Phys. Chem. Chem. Phys. **15**, 5477 (2013).
- [19] Y. Dubi and M. Di Ventra: *Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions*, Rev. Mod. Phys. **83**, 131 (2011).
- [20] B. Sothmann, R. Sánchez, and A. N. Jordan: *Thermoelectric energy harvesting with quantum dots*, Nanotechnology **26**, 032001 (2015).
- [21] A. N. Jordan, B. Sothmann, R. Sánchez, and M. Büttiker: *Powerful and efficient energy harvester with resonant-tunneling quantum dots*, Phys. Rev. B **87**, 075312 (2013).
- [22] S. Rodt and D. Bimberg: *Quantenpunkte: Technische Anwendungen der „künstlichen Atome“*, Welt der Physik: <https://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/halbleiter-quantenpunkte/anwendungen/> (Abgerufen am 12. Juli 2017).
- [23] C. W. J. Beenakker and A. A. M. Staring: *Theory of the thermopower of a quantum dot*, Phys. Rev. B **46**, 9667 (1992).
- [24] T. E. Humphrey, R. Newbury, R. P. Taylor, and H. Linke: *Reversible Quantum Brownian Heat Engines for Electrons*, Phys. Rev. Lett. **89**, 116801 (2002).
- [25] C. Van den Broeck: *Thermodynamic Efficiency at Maximum Power*, Phys. Rev. Lett. **95**, 190602 (2005).
- [26] N. Nakpathomkun, H. Q. Xu, and H. Linke: *Thermoelectric efficiency at maximum power in low-dimensional systems*, Phys. Rev. B **82**, 235428 (2010).

- [27] M. Esposito, K. Lindenberg, and C. Van den Broeck: *Thermoelectric efficiency at maximum power in a quantum dot*, Europhys. Lett. **85**, 60010 (2009).
- [28] B. Sothmann, R. Sánchez, A. N. Jordan, and M. Büttiker: *Rectification of thermal fluctuations in a chaotic cavity heat engine*, Phys. Rev. B **85**, 205301 (2012).
- [29] J. Koch, F. von Oppen, Y. Oreg, and E. Sela: *Thermopower of single-molecule devices*, Phys. Rev. B **70**, 195107 (2004).
- [30] Y. Zhang, Y. Wang, C. Huang, G. Lin, and J. Chen: *Thermoelectric performance and optimization of three-terminal quantum dot nano-devices*, Energy **95**, 593 (2016).
- [31] P. Mani, N. Nakpathomkun, E. A. Hoffmann, and H. Linke: *A Nanoscale Standard for the Seebeck Coefficient*, Nano Lett. **11**, 4679 (2011).
- [32] K. Yamamoto, O. Entin-Wohlman, A. Aharony, and N. Hatano: *Efficiency bounds on thermoelectric transport in magnetic fields: The role of inelastic processes*, Phys. Rev. B **94**, 121402 (2016).
- [33] Y. Choi and A. N. Jordan: *Three-terminal heat engine and refrigerator based on superlattices*, Physica E **74**, 465 (2015).
- [34] C. H. Schiegg: *Charge and energy transport through quantum dots*, Masterarbeit, Universität Augsburg (2014).
- [35] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik Band 7: Viel-Teilchen-Theorie*, Springer Verlag (2005).
- [36] G. D. Mahan: *Many-Particle Physics*, Springer Verlag (2000).
- [37] K. Penc and F. Mila: *Charge gap in the one-dimensional dimerized Hubbard model at quarter-filling*, Phys. Rev. B **50**, 11429 (1994).
- [38] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik Band 5.1: Quantenmechanik - Grundlagen*, Springer Verlag (2013).
- [39] J. E. Hirsch: *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study*, Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985).
- [40] A. Theumann: *Single-Particle Green's Function for a One-Dimensional Many-Fermion System*, J. Math. Phys. **8**, 2460 (1967).
- [41] A. Branschädel, G. Schneider, and P. Schmitteckert: *Conductance of inhomogeneous systems: Real-time dynamics*, Ann. Phys. **522**, 657 (2010).

- [42] R. Landauer: *Electrical Resistance of Disordered One-dimensional Lattices*, Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
- [43] S. Datta: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).
- [44] M. Di Ventra: *Electrical Transport in Nanoscale Systems*, Cambridge University Press (2008).
- [45] C. Schiegg, M. Dzierzawa, and U. Eckern: *Non-equilibrium transport through a model quantum dot: Hartree-Fock approximation and beyond*, New J. Phys. **17**, 083060 (2015).
- [46] S. Schenk, P. Schwab, M. Dzierzawa, and U. Eckern: *Density functional theory for a model quantum dot: Beyond the local-density approximation*, Phys. Rev. B **83**, 115128 (2011).
- [47] P. Fulde: *Electron correlations in molecules and solids*, Springer Verlag (1993).
- [48] J.E. Hirsch: *Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models*, Phys. Rev. B **28**, 4059(R) (1983).
- [49] R. Achilles and A. Bonfiglioli: *The early proofs of the theorem of Campbell, Baker, Hausdorff, and Dynkin*, Arch. Hist. Exact Sci. **66**, 295 (2012).
- [50] M. Paulsson and M. Brandbyge: *Transmission eigenchannels from nonequilibrium Green's functions*, Phys. Rev. B **76**, 115117 (2007).
- [51] E. Khosravi, A.-M. Uimonen, A. Stan, G. Stefanucci, S. Kurth, R. van Leeuwen, and E. K. U. Gross: *Correlation effects in bistability at the nanoscale: Steady state and beyond*, Phys. Rev. B **85**, 075103 (2012).
- [52] S. T. Carr, D. A. Bagrets, and P. Schmitteckert: *Full Counting Statistics in the Self-Dual Interacting Resonant Level Model*, Phys. Rev. Lett. **107**, 206801 (2011).
- [53] Wolfram Research, Inc: *HypergeometricPFQ*, <http://functions.wolfram.com/HypergeometricFunctions/Hypergeometric3F2/06/01/03/01/01/> (Abgerufen am 23. Mai 2017).
- [54] L. Freton and E. Boulat: *Out-of-Equilibrium Properties and Nonlinear Effects for Interacting Quantum Impurity Systems in the Strong-Coupling Regime*, Phys. Rev. Lett. **112**, 216802 (2014).
- [55] Y. Vinkler-Aviv, A. Schiller, and F. B. Anders: *From thermal equilibrium to nonequilibrium quench dynamics: A conserving approximation for the interacting resonant level*, Phys. Rev. B **90**, 155110 (2014).
- [56] A. Braun and P. Schmitteckert: *Numerical evaluation of Green's functions based on the Chebyshev expansion*, Phys. Rev. B **90**, 165112 (2014).

- [57] I. L. Aleiner, P. W. Brouwer, and L. I. Glazman: *Quantum effects in Coulomb blockade*, Physics Reports **358**, 309 (2002).
- [58] L. Kouwenhoven and L. I. Glazman: *Revival of the Kondo effect*, Physics World **14**, 33 (2001).
- [59] R. Gross and A. Marx: *Festkörperphysik*, De Gruyter (2014).
- [60] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin: *Solid state physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [61] K. Biswas, J. He, I. D. Blum, C.-I. Wu, T. P. Hogan, D. N. Seidman, V. P. Dravid, and M. G. Kanatzidis: *High-performance bulk thermoelectrics with all-scale hierarchical architectures*, Nature **489**, 414 (2012).
- [62] H. B. Callen: *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley & Sons (1985).
- [63] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik Band 6: Statistische Physik*, Springer Verlag (1994).
- [64] Wikipedia, Die freie Enzyklopädie: https://de.wikipedia.org/wiki/Elektrischer_Leitwert (Abgerufen am 18. September 2017).
- [65] G. Benenti, G. Casati, T. Prosen, and K. Saito: *Fundamental aspects of steady state heat to work conversion*, arXiv:1311.4430 (2013).
- [66] Wolfram Research, Inc: [http://www.wolframalpha.com/input/?i=integrate+x%5E14*exp\(x\)%2F\(exp\(x\)%2B1\)%5E2+from+-infty+to+infty](http://www.wolframalpha.com/input/?i=integrate+x%5E14*exp(x)%2F(exp(x)%2B1)%5E2+from+-infty+to+infty) (Abgerufen am 29. Juni 2017).
- [67] R. Raimondi, G. Savona, P. Schwab, and T. Lück: *Electronic thermal conductivity of disordered metals*, Phys. Rev. B **70**, 155109 (2004).
- [68] H. J. Goldsmid: *Thermoelectric Refrigeration*, Plenum Press (1964).
- [69] H. S. Kim, W. Liu, G. Chen, C.-W. Chu, and Z. Ren: *Relationship between thermoelectric figure of merit and energy conversion efficiency*, Proc. Natl. Acad. Sci. **112**, 8205 (2015).
- [70] L. D. Hicks and M. S. Dresselhaus: *Thermoelectric figure of merit of one-dimensional conductor*, Phys. Rev. B **47**, 16631 (1993).
- [71] G. D. Mahan and J. O. Sofo: *The best thermoelectric*, Proc. Natl. Acad. Sci. **93**, 7436 (1996).
- [72] R. S. Whitney: *Finding the quantum thermoelectric with maximal efficiency and minimal entropy production at given power output*, Phys. Rev. B **91**, 115425 (2015).
- [73] S. Hershfield, K. A. Muttalib, and B. J. Nartowt: *Nonlinear thermoelectric transport: A class of nanodevices for high efficiency and large power output*, Phys. Rev. B **88**, 085426 (2013).

- [74] C. H. Schiegg, M. Dzierzawa, and U. Eckern: *Implementation of transmission functions for an optimized three-terminal quantum dot heat engine*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 085303 (2017).
- [75] T. Fließbach: *Statistische Physik*, Spektrum Akademischer Verlag (2007).
- [76] B. Szukiewicz, U. Eckern, and K. I. Wysokiński: *Optimisation of a three-terminal nonlinear heat nano-engine*, New J. Phys. **18**, 023050 (2016).
- [77] B. Sothmann, R. Sánchez, and A. N. Jordan: *Thermoelectric energy harvesting with quantum dots*, Nanotechnology **26**, 032001 (2015).
- [78] H. Thierschmann, R. Sánchez, B. Sothmann, F. Arnold, C. Heyn, W. Hansen, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp: *Three-terminal energy harvester with coupled quantum dots*, Nat. Nanotech. **10**, 854 (2015).
- [79] R. Sánchez and M. Büttiker: *Optimal energy quanta to current conversion*, Phys. Rev. B **83**, 085428 (2011).
- [80] R. S. Whitney: *Most Efficient Quantum Thermoelectric at Finite Power Output*, Phys. Rev. Lett. **112**, 130601 (2014).
- [81] Wolfram Research, Inc: [http://www.wolframalpha.com/input/?i=integrate+x%2F\(exp\(a\(x-b\)\)\)%2B1](http://www.wolframalpha.com/input/?i=integrate+x%2F(exp(a(x-b)))%2B1) (Abgerufen am 30. Juli 2017).
- [82] M. Mardaani and K. Esfarjani: *Some analytical results in phase coherent transport in quantum wire*, Physica E **25**, 119 (2004).
- [83] H. Karbaschi, J. Lovén, K. Courteaut, A. Wacker, and M. Leijnse: *Nonlinear thermoelectric efficiency of superlattice-structured nanowires*, Phys. Rev. B **94**, 115414 (2016).
- [84] A. A. Gorbatsevich and N. M. Shubin: *PT-Symmetry Breaking in Resonant Tunneling Heterostructures*, JETP Lett. **103**, 769 (2016).
- [85] M. E. A. El-Mikkawy: *On the inverse of a general tridiagonal matrix*, Applied Mathematics and Computation **150**, 669 (2004).
- [86] K. E. Atkinson: *An Introduction to Numerical Analysis*, John Wiley & Sons (1989).
- [87] L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön: *Mesoscopic Electron Transport*, Kluwer Academic, Dordrecht (1997).
- [88] M. Zilly: *Electronic conduction in linear quantum systems: Coherent transport and the effects of decoherence*, Dissertation, Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen (2010).

- [89] M. Bravi, R. Farchioni, G. Grosso, and G. P. Parravicini: *Electronic transmission through a polyacene ladder with a substitutional edge impurity*, Phys. Rev. B **87**, 035105 (2013).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei allen bedanken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

- In erster Linie möchte ich mich bei Prof. Dr. Ulrich Eckern bedanken, der mir die Möglichkeit gab zu promovieren und in seiner Gruppe zu arbeiten.
- Für die vielen Diskussionen und für das Korrekturlesen dieser Arbeit danke ich Dr. Michael Dzierzawa vielmals, der auch immer bei Fragen eine offene Tür für mich hatte.
- Ein großer Dank geht an Prof. Dr. Karol Wysokiński für die sehr gute Zusammenarbeit und für die Einladung nach Lublin an die Maria Curie-Skłodowska University.
- Zudem möchte ich mich herzlich bei meinen Arbeitskollegen Andreas Prinz-Zwick, Benjamin Spreng, Michael Hartmann, Sebastian Tölle und Wilhelm Appelt für die angenehme Atmosphäre bei der Arbeit bedanken.
- Vielen Dank auch unserer Sekretärin Marion Amling, die mir bei Angelegenheiten rund um die Verwaltung immer geholfen hat.
- Für die Unterstützung, sowohl während meines Studiums, aber auch während meiner Promotion danke ich auch meinen Eltern Christine und Hubert Schiegg und meinen Brüdern Jonas Schiegg und Florian Schiegg.
- Der größte Dank geht an meine Frau Severine, die immer für mich da ist und mich während des Studiums und der Promotion jederzeit unterstützt und ermutigt hat.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Christian Hermann Schiegg
Geburtsdatum, -ort: 09.09.1986, Lindenberg i.A.
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulische und akademische Ausbildung

seit 10/2014	Universität Augsburg, Lst. für Theoretische Physik II Wissenschaftlicher Mitarbeiter Promotion zum Dr. rer. nat.
10/2012 – 09/2014	Universität Augsburg Physikstudium, Abschluss: Master of Science
10/2009 – 08/2012	Universität Augsburg Physikstudium, Abschluss: Bachelor of Science
09/2006 – 07/2008	Staatliche Berufsoberschule Kempten allgemeine Hochschulreife
09/2003 – 07/2006	Deutsche Telekom AG, Kempten Ausbildung zum IT-System-Elektroniker
07/2003	Staatliche Realschule Lindenberg i.A. mittlere Reife

Zivildienst

07/2008 – 04/2009	AWO Seniorenheim Alpenblick Schwaben e.V. Zivildienst
-------------------	---